

**Benkő József**

**A diamágneses Coulomb-probléma az  
asztrofizikában**

DOKTORI (PHD) ÉRTEKEZÉS

Témavezető:

Barcza Szabolcs tudományos főmunkatárs

MTA Csillagászati Kutatóintézet

BUDAPEST, 1999

**Tartalom**

1. Bevezető	3
2. Az erős mágneses terű csillagok színeképe	4
2.1. A megfigyelésekről	5
2.2. A modellezésről	10
3. Az energia-sajátállapotok	13
3.1. Alapegyenletek	13
3.2. A sajátérték-feladat megoldási módszerei	15
4. A feladat Liu–Starace bázisban	21
4.1. A bázisegyenlet	23
4.2. A csatolómátrixok	28
4.3. A csatolt egyenletrendszer	31
4.4. Numerikus eredmények	34
5. Elektromágneses átmeneti valószínűségek	41
5.1. Alapegyenletek	41
5.2. A dipóluserősség közvetlen kiszámítása	43
5.3. A módszer numerikus tesztje	49
6. Összefoglalás	51
7. Köszönetnyilvánítás	53
8. Függelék	54
8.1. Matematikai kiegészítés	54
8.2. A sajátértékek kiszámítása	59
8.3. A dipóluserősség kiszámítása	60
9. Irodalom	62

## 1. Bevezető

Ha erős mágneses terű csillagok – fehér törpék vagy neutroncsillagok – modellszínképét akarjuk megszerkeszteni, kikerülhetetlen feladat az erős, homogén mágneses térbe tett hidrogénatom energianívóinak meghatározása, azaz a diamágneses Coulomb-probléma megoldása. Külön szerencse, hogy ennek a problémának a megoldása a legtöbbször elegendő is, mivel az ilyen degenerált csillagok fotoszférájából – az esetek túlnyomó többségében és az optikai tartományban – csak a hidrogént észleljük. Vagyis az ilyen objektumok spektruma közel sem olyan összetett, mint a közönséges (nem elfajult) csillagoké, amelyet rengeteg semleges és ionizált atom, sőt, molekula alakít ki. A csak hidrogénből álló légkörök jobb megértése azonban ilyenkor is adhat új eredményeket azáltal, hogy a hidrogénből álló légkört pontosabban lehet szeparálni.

Sajnos, a probléma mégsem olyan egyszerű, mint azt ezek után gondolnánk! Noha a diamágneses Coulomb-problémát már a kvantummechanika kezdeti időszakában megfogalmazták, a megoldás mindmáig nem tekinthető teljesnek. Az asztrofizikai célokra is megfelelő első számítások a hetvenes-nyolcvanas évek fordulója táján készültek. Ezek folytatásaként, több mint száz kutató közreműködésével, közel húsz év alatt készült el az a munka, amely jelenleg a legteljesebbnek tekinthető a témában.

Ennek a dolgozatnak a fő célja az, hogy megmutassuk, hogy ezek az eredmények, sőt ezeken túlmenők is, nagyságrendekkel kisebb erőforrásokkal (szuperszámítógépek nélkül) is megkaphatók. Ehhez megfelelő, a fizikát jobban figyelembe vevő *matematikai modell* és hatékony *numerikus technikák* szükségeltetnek. Az itt kifejtett módszerek azon túl, hogy teljesen újak, eléggé általánosak is, így hasonló jellegű problémáknál valószínűleg szintén sikeresen alkalmazhatók lesznek.

## 2. Az erős mágneses terű csillagok színe

Ebben a részben nagy vonalakban összefoglalom az általam fontosnak tartott észlelési és elméleti eredményeket. Megpróbálom ezáltal megmutatni, hogy a későbbiekben sorra kerülő konkrét vizsgálataim hogyan illeszkednek be egy nagyobb képbe.

A dolgozat aránytalanná válását elkerülendő csak néhány különösen fontos momentumra hívom fel a figyelmet. Bővebb információ található a témában megjelent áttekintő cikkekben és a bennük hivatkozott munkákban. Általában a csillagok mágneses tereire vonatkozóan Landstreet (1992) áttekintése ajánlható. A degenerált objektumok mágneses térééről, annak eredetéről, időbeli változásáról jó összefoglaló Chanmugam (1992) cikke. Általában a fehér törpékről, köztük az erős mágneses terüekről szól Koester és Chanmugam (1990) összefoglalója. Speciálisan a mágneses fehér törpékről megjelent áttekintő cikkek Landstreet (1994) és Wickramasinghe (1995) munkái, illetve neutroncsillagokról Mészáros (1992) könyve.

Mindenekelőtt tisztázni kell, hogy mit értünk ebben a dolgozatban „erős mágneses tér” alatt. Ehhez tekintsük át, hogy milyen erős mágneses terek fordulnak elő a természetben. A számszerű jellemzésre a mágnesesfluxus-sűrűséget kell használnunk, hiszen a mágnesestérerősség-vektor csak vákuumban van definiálva. (A csillagok légköre jó közelítéssel vákuumnak tekinthető és ezért az irodalomban mindig mágneses térerősségről beszélnek, a használt mértékegység szempontjából azonban fontos ez a megkülönböztetés.) Az 1. táblázatban néhány tájékoztató jellegű adat látható. A

**1. táblázat.** Néhány mágneses fluxussűrűség-érték.

objektum	fluxussűrűség [T]
Föld mágneses egyenlítőjén	$\sim 3.5 \times 10^{-5}$
Föld mágneses sarkain	$\sim 6.5 \times 10^{-5}$
Nap fotoszférájában	$10^{-4} - 10^{-3}$
napfoltokban	$0.2 - 0.4$
Ap csillagok felszínén	$\sim 2 - 3$
Fermilab Tevatron gyorsítóban	$\sim 5$
mágneses fehér törpék légkörében	$\sim 10^2 - 10^5$
mágneses neutroncsillagokon	$\sim 10^7 - 10^9$

táblázatra pillantva azonnal szembeszökő az az óriási különbség, amely a mágneses fehér törpék és neutroncsillagok jellemző értékei és az egyéb értékek között van. Egyetlen mesterséges forrás is szerepel ebben az összeállításban, hogy felmérhessük a földi fizika határait. A világ legnagyobb gyorsítójában, a Tevatronban a Földön valaha előállított legnagyobb állandó tér fluxussűrűsége szerepel itt. Ebből nyilvánvaló, hogy a belátható jövőben az asztrofizikában előforduló nagy mágneses terek kísérleti előállítása

és vizsgálata nem valószínű. Az ilyen erős mágneses térbe tett anyag viselkedésének vizsgálatára tehát – az asztrofizikában megszokott módon – az észlelés és az elméleti modellezés kettőse marad.

Itt mutatkozik meg az, amivel az asztrofizika fontosságát szokták indokolni, vagyis hogy a vizsgált objektumok, jelenségek az anyagnak olyan tulajdonságairól adnak információkat, amelyekről egyéb módon nem szerezhethetnénk tudomást. Igen fontosak ezek a vizsgálatok a fizikai törvények hatókörének megállapításakor is.

### 2.1. A megfigyelésekről

A csillagok mágneses terének mérése a jól ismert Zeeman-effektuson alapul. Nagyfelbontású színeképet kell készíteni, majd a megfelelő vonalak felhasadásának mérésével megkapható az adott csillagon a kibocsátó közeg (felszín-légkör) mágneses fluxussűrűsége. Gyenge terek esetén ( $\sim 1$  T alatt) megfigyelhető felhasadás nincs. Ilyenkor a vonalon belüli polarizáció mérése adja a fluxussűrűség értékét. A Zeeman-effektuson alapuló módszerek jól működnek a nem kompakt csillagok esetében, elvileg  $< 10^3$  T-ig. Az ennél erősebb terek kimutatása azonban csak az ilyen fluxussűrűséget figyelembe vevő elméleti számításokból kapott szintetikus spektrumok és az észlelt színeképek összevetéséből remélhető.

Az elméleti modellek azt jósolták, hogy a gravitációs kollapszus során, amelyben a fehér törpék és neutroncsillagok kialakulnak, a kiinduló mágneses fluxus megmarad. (Ennek oka a csillagok anyagának jó vezetőképessége.) Mivel pedig a csillag felszíne a fehér törpévé válás során kb.  $10^4$ -ed részére zsugorodik a fősorozati méretéhez képest, ill. neutroncsillaggá válás esetén ez a csökkenés kb.  $10^{10}$ -szerez, a mágnesesfluxus-sűrűség ennyiszeresére nő. Noha mindez már régóta ismeretes (l. Blackett 1947), mégis a 70-es évek végéig kellett várni, míg bebizonyosodott, hogy a fehér törpéken tényleg  $10^2 - 10^5$  T-s terek vannak. Ekkor készültek ugyanis az első szintetikus spektrumok mágneses fehér törpék légkörére.

A jelenleg katalogizált mintegy 2100 fehér törpe 2%-ának van erős mágneses tere. Miért csak ilyen kevésnek? Ez nem teljesen tisztázott. A két legvalószínűbb magyarázat az, hogy

[1] a fehér törpék hűlése során mágneses terük lecseng, így csak a viszonylag fiatal objektumok esetében várunk számottevő mágneses teret. Ezt a magyarázatot valószínűsíti az, hogy a magasabb effektív hőmérsékletűek (a fiatalabbak) szignifikánsan erősebb terűek.

[2] A mágneses fehér törpék protocsillagai eleve sokkal erősebb terekkel rendelkezhetnek az átlagos csillagokénál. Ezt az elképzelést az Am csillagok és a mágneses fehér törpék galaktikus eloszlásában mutatkozó korreláció támasztja alá. A ma ismert mágneses fehér törpék főbb adatait a 2. táblázat tartalmazza.

**2. táblázat.** Az ismert mágneses fehér törpék néhány alapadata Jordan (1997) alapján.

név	V[mag]	T [K]	színeképi jelleg	forgási per.	B [kT]
G 234 – 4	15.09	4500	H		$\sim 0.004$
LHS 1038	14.36	6400	H	2–20 <sup>h</sup>	$\sim 0.01$
LP 907 – 037	14.55	9500	H		$\sim 0.01$
LB 8827	18.83	20000	He		$\sim 0.1$
GD 077	14.80	$\sim 10000$	H		0.12
PG 0136+251	15.83	40000	H		0.13?
G 141 – 2	15.91	5600	H		0.2?
PG 1658+440	14.9	30500	H		0.22
PG 1220+234	15.57	27200	H		$\sim 0.3$
G 99 – 37	14.60	6300	C <sub>2</sub> , CH		$\sim 0.36$
G 256 – 7	16.00	5600	H		0.49
MWD 0159 – 032	17.1	26000	H		0.6
LHS 1734	15.7	5300	H	16 <sup>m</sup> –1 év	0.73
G 62 – 46	17.11	$\sim 6050$	H		0.74
HS 1440+7518	14.9	40000	H		$\sim 0.8$
HS 1254+3440	17	10-15000	H		$\sim 0.95$
GD 90	15.74	11000	H		1
MWD 0307 – 428	16.3	25000	H		1
PG 1312+098	16.37	15000	H	5.43 <sup>h</sup>	1
LHS 2273	16.48	$\sim 6000$	H		$\sim 1$
G 183 – 35	16.4	$\sim 7000$	H	50 <sup>m</sup> – ? év	$< 1.4$
GD 356	15.06	7500	H (em.)		$\sim 1.4$
KUV 03292+0035	16.70	19000	H		1.2
KPD 0253+5052	15.22	$\sim 15000$	H	4.1 <sup>h</sup>	1.7
LHS 1044	15.3	6000	H	4.4 <sup>h</sup> ?	1.67
G 99 – 47	14.10	5600	H	1 <sup>h</sup> ?	2.7
RE 0616 – 646	18.4	35000	H		2
LBQS 1136 – 0132	18	15000	H		2.4
ESO 439 – 162	18.77	5400	C <sub>2</sub>		0–3?
PG 1533 – 057	15.32	17000	H	$\sim 1^d$	3.1
HE 1045 – 0908	16.5	9000	H		3.1
Feige 7	14.46	20000	H, He	2.2 <sup>h</sup>	3.5
BPM 25114	15.62	20000	H	2.8 <sup>d</sup>	3.6
KUV 23162-1230	15.38	11800	H	17.9 <sup>d</sup>	5.6
GD 116	15.96	16000	H		6.5
HE 1211 – 1707	16.9	$\sim 20000$	H	1.75 <sup>h</sup>	8?
G 195 – 19	13.79	8000	?	1.33 <sup>d</sup>	$\sim 10$
HE 0000 – 3430	15.0	7000	H		12
PG 1015+014	16.33	14000	H	1.65 <sup>h</sup>	12
LP 790 – 29	15.9	7500	C <sub>2</sub>	$> 100$ év	$\sim 20$
G 227 – 35	15.58	7000	H	$> 100$ év	20.5

**2. táblázat** folytatás.

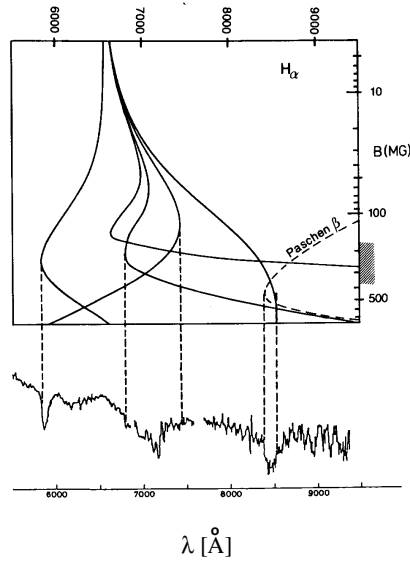
név	V[mag]	T [K]	színképi jelleg	forgási per.	B [kT]
G 240 – 72	14.15	6000	?	> 100 év	~ 20
Grw +70°8247	13.19	15000	H	> 100 év	32
G 111 – 49	16.28	8400	H		~ 22
HE 0127 – 3110	16.1	18000	H		34.5
HE 2201 – 2250	16.2	18000	H		34.5
RE 0317 – 853	14.8	50000	H		66
LB 11146b	14.32	16000	H+?		67
SBS 1349+5434	16.4	11000	H		76
PG 1031+234	15.10	~ 15000	H	3.4 <sup>d</sup>	50–100
GD 229	14.85	16000	?	~ 100 év	~ 100

Az első két ábra a híres Grw+70°8247 jelű mágneses fehér törpe észlelt és a legújabb táblázatok alapján számolt színképének sikeres összevetését mutatja. A vonalak azonosítása igen jónak mondható. A 3. ábra ellenpéldákat mutat. A GD 229 jelű csillag egyetlen vonalát sem sikerült azonosítani. Az LB 11146b csillag egyes vonalai a hidrogén 70 kT-nál számolt vonalaival lehet azonos, bár az identifikáció meglehetősen bizonytalan.

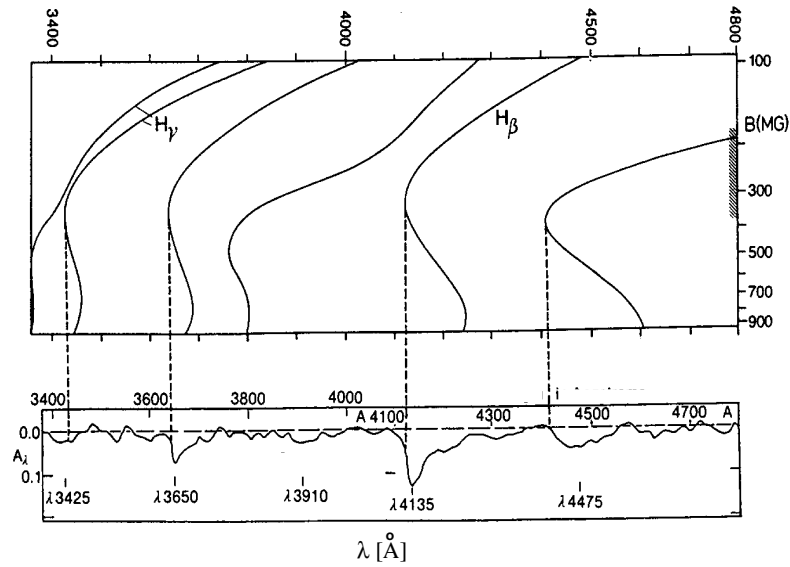
A kb.  $10^8$  T-nál erősebb terekre még ma is csak közvetett bizonyítékok vannak. A fent elmondottakból következik, hogy a mágneses neutroncsillagok (pulzárok) tipikus terei ennél nagyobbak, de ezek az objektumok igen halványak, így igazi színkép egyetlenről sem készült. A 4. ábrán az egyik legfrissebb eredmény látható: a talán legközelebbi neutroncsillagról (a Gemingáról) a 10 m-es Keck-teleszkóppal készült optikai spektrum. Mindössze egyetlen vonal látszik rajta, de minden bizonnyal azt is a szabad elektronok valamilyen nemtermális folyamata (valószínűleg ciklotron átmenet) okozhatja.

Az 5. ábrán szintén egy új eredmény van, amelyet szerzőik úgy értelmeznek, hogy ez az első közvetlen bizonyíték  $10^{10}$  T-s terekre. Az ábrán a COMPTON nevét viselő és a gammatartományban észlelő csillagászati mesterséges hold OSSE nevű berendezésével készült gammaspektrum látható, amelyet az A0535 – 26 jelű neutroncsillagról készítettek. A folytonos vonalak a szintetikus spektrumot mutatják két fluxussűrűség-értéknél.

Egyéb esetekben a pulzárok (= egyedülálló neutroncsillagok) mágneses terét a  $B^2 \propto P\dot{P}$  képlettel szokás becsülni. Itt B a mágneses fluxussűrűség a pólusokon, P a pulzár forgási periódusa,  $\dot{P}$  pedig a forgási periódus időderiváltja (lassulási mértéke). A pulzárok esetén P és  $\dot{P}$  igen pontosan mérhető. A képlet abból a feltevésből adódik, hogy a pulzár periódusának csökkenését a forgó mágneses momentuma által kibocsátott

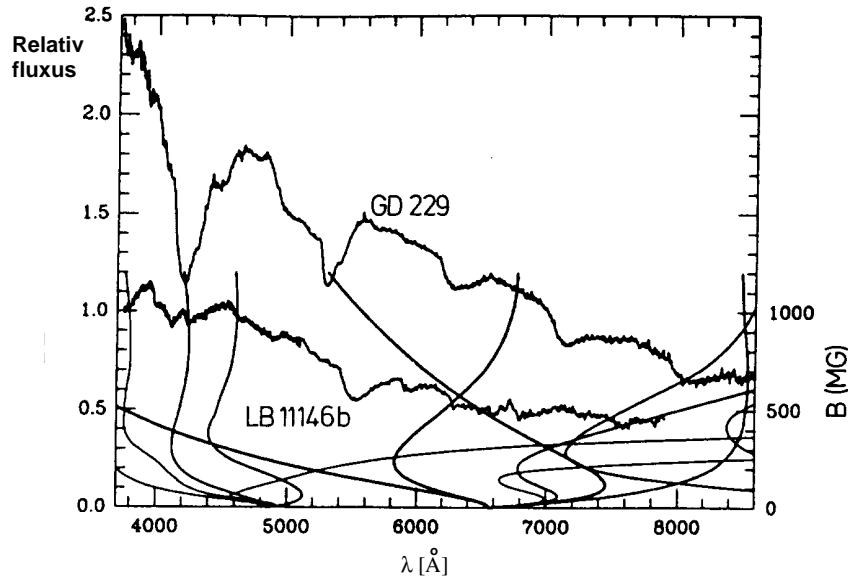


**1. ábra.** A Grw+70°8247 jelű mágneses fehér törpe optikai színekének vörös része és a vonalazonosítás. A felső ábra a  $H\alpha$  átmenethez tartozó stacionárius vonalak 0.4–70 kT közötti számított változását mutatja. A vízszintes tengelyen a hullámhossz szerepel Å-ben. A függőleges tengelyen a fluxussűrűség MG egységekben (1 MG=100 T) fentről lefelé növekszik! Ruder és tsai (1994) nyomán.

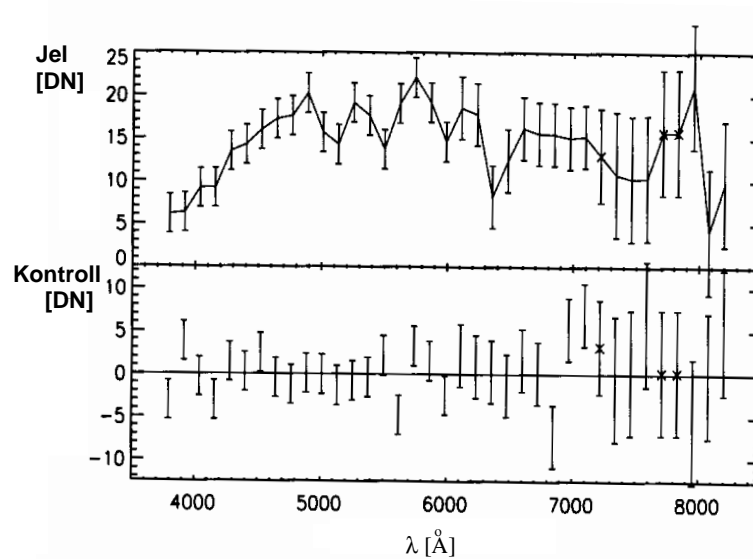


**2. ábra.** A Grw+70°8247 jelű mágneses fehér törpe optikai színekének kék tartománya és a vonalazonosítás. A felső ábra a  $H\beta$  és  $H\gamma$  átmenetekhez tartozó stacionárius vonalak 10–90 kT közötti változását mutatja. A tengelyek azonosak az előző ábráéval. Ruder és tsai (1994) nyomán.

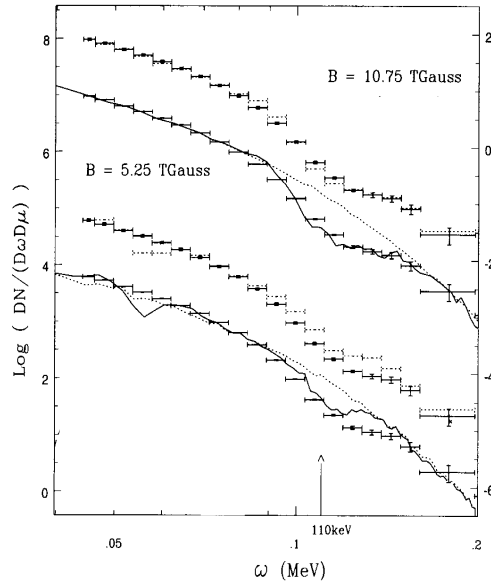




**3. ábra.** A GD 229 és az LB 11146b jelű fehér törpék észlelt spektruma és a hidrogén stacionárius vonalai az azonosításhoz. A GD 229 esetében egyetlen vonal azonosítása sem sikerült. Szintén nem sikerült megmagyarázni az LB 11146b egyes vonalait. A bal oldali függőleges tengely (fluxussűrűség) az előző két ábrához képest ellentétes irányú! Wickramasinghe (1995) nyomán.



**4. ábra.** A Geminga optikai spektruma Martin és tsai (1998) alapján. A felső panelen a Geminga spektruma, az alsón a kalibráló spektrum látható. A vízszintes tengelyen a hullámhossz Å egységekben ( $1 \text{ nm} = 10 \text{ Å}$ ). A függőleges tengelyeken a fluxus  $1 \text{ DN} = 1 \text{ egység} (2.43 \text{ Å})^{-1} (1800 \text{ s})^{-1}$ .



**5. ábra.** Az A0535 – 26 jelű neutroncsillag spektruma a röntgentartományban. Az észlelt spektrumhoz (szakaszok) jobban illeszkedik a nagyobb térerősséget feltételező modell (folytonos vonalak). Ez az első közvetlen bizonyíték  $10^{10}$  T-s terek létezésére. Araya és Harding (1996) nyomán. (Itt  $N$  a fotonok száma,  $\mu = \cos \Theta$ , ahol  $\Theta$  a tér látóiránnyal bezárt szöge. A fotonok hullámhossza energiájukkal,  $\omega$ -val van jellemezve.)

elektromágneses sugárzás okozza a klasszikus elektrodinamika szerint. A  $B$ -re így persze csak egy felső becslés kapható. Manapság mintegy 500 rádiótartományban felfedezett neutroncsillag (pulzár) ismeretes, de az eddigiekből következik, hogy ezekre a 2. táblázathoz hasonló összeállítás nem létezik.

## 2.2. A modellezésről

A csillagok színekének modellezése a ma megkövetelt pontossággal igen nehéz, nagy számításigényű feladat, s mint ilyen jobbára kívül esik a hazai lehetőségeken. Azonban jól megválasztott speciális témákban mi is érdemben hozzá tudunk járulni az itt folyó munkához.

Amit modelleznünk kell, az az észlelt sugárzási fluxuselozlás, vagyis

$$F_\nu(0) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty I_\nu(\tau'_\nu, \theta, \varphi) \cos \theta \sin \theta d\tau'_\nu d\varphi d\theta, \quad (1)$$

(l. pl. Unsöld 1968) ahol az  $F_\nu(\tau_\nu = 0) = F_\nu(0)$  a monokromatikus fluxuselozlást jelenti a csillag felszínén a  $\nu$  frekvencia szerint,  $I_\nu(\tau_\nu, \theta)$  a monokromatikus intenzitás,  $\theta$  a látóiránytól,  $\varphi$  az arra merőlegesen mért polárszög,  $\tau_\nu$  pedig az optikai mélység. Szokásos definíciója  $d\tau_\nu = \kappa_\nu ds$ , ahol  $ds$  a közeg geometriai vastagsága és a  $\kappa_\nu$  arányossági tényező a monokromatikus abszorpciók együttható. Megjegyzendő, hogy (1) felírásakor már az

ún. redukált színeképet tételeztük fel és nem a közvetlen észleltet, azaz az észlelési technikákból adódó zajok, a Föld légkörének és a csillagközi anyag zavaró hatásainak kiszűrése után kapottat.

A fenomenologikus sugárzáselmélet keretei között a csillagokban lezajló mikrofizikai folyamatokat a  $\kappa_\nu$ -n keresztül vesszük figyelembe és így vizsgáljuk az elektromágneses sugárzás terjedését.  $I_\nu$  meghatározására az ún. transzfer-egyenletek szolgálnak, (l. Mihalas 1978). Az  $I_\nu$ -re vonatkozó megfelelő egyenlet(ek) felírásához szükséges a teljes (minden lehetséges sugárzási folyamatot figyelembe vevő) monokromatikus abszorpciós koefficiens meghatározása. A különböző kötött–kötött, kötött–szabad, szabad–szabad átmenetekhez tartozó abszorpciós koefficiensek additívak, így lehetőség van az egyes folyamatok független tárgyalására. A lehetséges kötött–kötött átmenetek (abszorpció, spontán és indukált emisszió) közül elegendő egy típussal foglalkozni, mivel ezek a folyamatok egymástól nem függetlenek. A kapcsolatot közöttük az Einstein-féle átmeneti valószínűségekre vonatkozó jól ismert relációk adják meg (l. pl. Mihalas 1978).

A  $\kappa_\nu$  együttható a vonalas színekpre (kötött–kötött átmenetek) felírható úgy, hogy

$$\kappa_\nu = n_0 g_a e^{-E_a/kT} < \Psi_a, \mathbf{r} \Psi_b >^2 \Lambda(\nu). \quad (2)$$

A (2) formula értelmezése a következő: tegyük fel, hogy az adott  $(\nu, \nu + d\nu)$  frekvenciatartományban található egy színeképvonal. Keletkezzen ez a vonal egy atom valamilyen  $E_a$  sajátenergiájú állapotából egy  $E_b$  energiájú állapotába való átmenete során (abszorpció esetén  $E_a < E_b$ ). A megfelelő alapállapotú atomok számsűrűsége a csillag légkörében  $n_0$ , s mivel a csillaglégkörök nagyon jó közelítéssel teljesen relaxált plazmáknak tekinthetők, az  $a$  állapotban tartózkodás valószínűségét a Boltzmann-statisztika adja meg;  $g_a$  az  $a$  állapot statisztikus súlya,  $k$  a Boltzmann-állandó,  $T$  a hőmérséklet. Ebből az állapotból a  $b$ -be való átmenet valószínűségét adja meg a képletbeli skalárszorzat, ahol  $\Psi_a, \Psi_b$  a megfelelő állapotokhoz tartozó hullámfüggvények,  $\Lambda(\nu)$  a normált vonalprofil. A skalárszorzat ilyen felírása a dipólközelítésnek felel meg. Erről a 5.1 fejezetben részletesebben is szó lesz a dolgozat szűkebb témája kapcsán.

Egy csillag színeképére tekintve, illetve a fentebb elmondottakat figyelembe véve elég nyilvánvalónak tűnik az alábbi számítási program:

- a) A vonalak — helye  $E_a$ ,  
     — erőssége  $< \Psi_a, \mathbf{r} \Psi_b >^2$ ,  
     — profilja  $\Lambda(\nu)$ .
- b) A folytonos abszorpciós koefficiensek kiszámítása (kontinuum).
- c) A megfelelő áramlási egyenlet felírása és megoldása.

Ez a dolgozat a felsorolt teendők közül az első kettővel fog részletesebben foglalkozni.

A vonalak helyét a spektrumon belül úgy kaphatjuk meg, hogy a csillag légkörében fellelhető atomok és esetleg molekulák vonalait meghatározzuk. Ez technikailag

a megfelelő stacionárius Schrödinger-egyenletek sajátértékeinek meghatározásával egyenértékű, hiszen a vonalak helye ezután már a megfelelő kiválasztási szabályok figyelembevételével a  $h\nu = E_a - E_b$  képletből adódik. A mi esetünkben erős mágneses térbe tett atomok Schrödinger-egyenletét kell megoldani. A probléma nehézségét jelzi, hogy a mai napig csak a legegyszerűbb néhány atomi rendszerre készült ilyen számolás (H, He,  $H^-$ ,  $H_2^+$ ,  $Li^+$ ). Csillagászati szempontból elegendő számolás szinte csak a hidrogénre létezik. Szerencsére a fehér törpék és neutroncsillagok túlnyomó többségének tisztán hidrogén légköre van, míg egy sokkal kisebb részük héliumot is tartalmazhat (esetleg csak He-t). A jelenség oka az, hogy a különböző atomok a légkörben tömeg szerint rendeződnek (gravitációs differenciálódás). A nem mágneses fehér törpék vizsgálata megerősíti ezt az elképzelést, hiszen az ismert fehér törpék zöme DA típusú, azaz légköre tisztán hidrogén. Sokkal kisebb a He-légkörrel rendelkezők száma, míg alig néhány különleges csillag van példaként a más kémiai összetételre. A dolgozat 3.–4. fejezete ennek megfelelően a diamágneses Coulomb-problémával, azaz az erős mágneses térbe tett hidrogénatom Schrödinger-egyenletével foglalkozik.

A vonalak relatív erősségét egy adott hőmérsékleten az adja meg, hogy mekkora a kiinduló állapot populáltsága (mint azt a (2)-ben levő  $n_0 g_a \exp(\dots)$  tényező jelzi) és az átmeneti valószínűség a vonalat keltő két energia-sajátállapot között. A kötött–kötött állapotok esetén az oszcillátorerősséget a (2) kifejezésben szereplő kvadrátikus funkcionál kiszámítása fogja jelenteni. Mint az az 5. fejezetből kiderül, ez a számítás sem tekinthető triviálisnak.

### 3. Az energia-sajátállapotok

#### 3.1. Alapegyenletek

Ezek után rátérek a dolgozat fő témájára: az erős, homogén mágneses térbe helyezett hidrogénatom spektrumának vizsgálatára. (A mágneses tér az atomi mérettartományokban jó közelítéssel homogénnek tekinthető.) Az első feladat a lehetséges energiaszintek kiszámítása. A Dirac-, ill. Pauli-egyenlet helyett a stacionárius Schrödinger-egyenlet sajátértékeit határozzuk meg, tehát a relativisztikus hatásokat a számítások során elhanyagoljuk. A kérdéssel részletesen foglalkozik Lindgren és Virtamo (1979) valamint Doman (1980) cikke. Megállapításaik szerint a relativisztikus effektusok hasonló nagyságrendűek, mint az elektronok mágneses térre merőleges mozgásából adódók, de a kötött állapotok esetén ezek mindig elhanyagolhatók. Az olyan relativisztikus effektusok vizsgálata, mint a spin-pálya kölcsönhatásból adódó, vagy a mágneses Lamb-eltolódás, megtalálhatóak Wunner és tsai (1985) cikkében.

A továbbiakban végtelen magtömeget tételezünk fel. Abban a speciális esetben, ha az általánosított impulzus (definícióját és értelmezését l. Avron és tsai 1978) zérus, egzakt skálázó szabály adható a végtelen és véges magtömegű eset között (l. Pavlov-Verevkin és Zhilinskii 1980a,b). A tömegközéppont tetszőleges mozgását is figyelembe vevő, általános problémával foglalkozó első munkák csak a kilencvenes években kezdtek megjelenni (Vincke és tsai 1992, Potekhin 1994). Ez is jelzi a feladat összetettségét. A legújabb ilyen munka Lai és Salpeter (1995) a végtelen magtömegű eset ismeretében ad közelítő megoldást az általános problémára.

Az időtől független Schrödinger-egyenlet egy  $Z$  rendszámú hidrogénszerű ionra

$$\hat{H}\Psi = E\Psi, \quad (3)$$

ahol

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e}(\hat{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A})^2 + eV, \quad \hat{p} = -i\hbar\nabla, \quad V = -\frac{Z}{|\mathbf{r}|}. \quad (4)$$

(l. pl. Landau–Lifsic 1978). Itt a jelölések a szokásosak:  $\hat{H}$  a Hamilton-operátor,  $\Psi$  a sajátfüggvény,  $E$  az energia-sajátérték,  $\hat{p}$  az impulzus-operátor,  $m_e$  az elektron tömege,  $e$  a töltése,  $c$  a fénysebesség,  $V$  a skalárpotenciál (a mag Coulomb-tere),  $\mathbf{A}$  a mágneses teret jellemző vektorpotenciál,  $\mathbf{r}$  az elektron helyvektora,  $\hbar = h/2\pi$ , ahol  $h$  a Planck-állandó. Legyen

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{H} \times \mathbf{r}. \quad (5)$$

Ha az  $\mathbf{A}$  vektorpotenciált az (5) módon választjuk meg, ahol  $\mathbf{H}$  a mágneses térerősség-vektor, akkor ezzel a (4) kifejezésében a  $\text{div}\mathbf{A}$  tagot nullává tesszük. (Ezt az elektrodinamika jól ismert mértékinvarianciája teszi lehetővé.) Így (4) és (5)

behelyettesítése ill. (4)-ben a négyzetre emelés elvégzése után (3)

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta\Psi - \frac{ie\hbar}{2m_e c}\mathbf{A}\nabla\Psi + \left(\frac{e^2}{2m_e c^2}\mathbf{A}^2 - \frac{Z}{r}\right)\Psi = E\Psi \quad (6)$$

alakú lesz ( $r = |\mathbf{r}|$ ). Mutasson a mágneses térerősség-vektor a  $z$  tengely irányába, azaz legyen  $\mathbf{H} = (0, 0, H_z)$ . Vegyük észre, hogy

$$-\frac{ie\hbar}{m_e c}\mathbf{A}\nabla = \frac{eH_z}{m_e c}\hat{L}_z,$$

ahol  $\hat{L}_z$  az impulzusmomentum-operátor  $z$  komponense. Mivel az erős mágneses térbe tett atom közelítőleg hengersizmetrikus, ezután hengerkoordinátákat használunk. Atomi egységeket ( $m_e = \hbar = e = 1$ ), illetve a homogén mágneses tér jellemzésére az  $\omega = e|\mathbf{H}|/(2m_e c)$  Larmor-frekvenciát bevezetve a Hamilton-operátor

$$\hat{H}(\varrho, z) = -\frac{1}{2}\Delta + \omega n_3 + \frac{\omega^2 \varrho^2}{2} - \frac{Z}{\sqrt{\varrho^2 + z^2}} \quad (7)$$

alakú lesz. Itt már az  $n_3$  mágneses kvantumszám került az impulzusmomentum-operátor  $z$  komponense helyére, mivel a  $\hat{H}$  és  $\hat{L}_z$  operátorok egymással felcserélhetők. Vagyis az  $\hat{L}_z\zeta(\varphi) = n_3\zeta(\varphi)$  és a (4) sajátérték-egyenlet szimultán kielégíthető. Így a sajátfüggvény felírható, mint

$$\begin{aligned} \Psi(\varrho, z, \varphi) &= \zeta(\varphi)\psi(\varrho, z) \\ &= (2\pi)^{-1/2} \exp(in_3\varphi)\psi(\varrho, z). \end{aligned} \quad (8)$$

Ezek után a megoldandó sajátérték-feladat

$$\begin{aligned} \left[ \frac{\partial^2}{\partial \varrho^2} + \frac{1}{\varrho} \frac{\partial}{\partial \varrho} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{n_3^2}{\varrho^2} + \frac{2Z}{\sqrt{\varrho^2 + z^2}} - \omega^2 \varrho^2 + 2E^* \right] \psi &= 0, \\ 0 < \varrho < \infty, \quad -\infty < z < \infty, \quad E^* &= E - \omega n_3. \end{aligned} \quad (9)$$

A fizikai megoldások kiválasztására szolgáló szokásos peremfeltételek: a megoldásnak a tér minden pontjában korlátosnak kell lennie. A kötött állapotokra még a

$$\int \Psi_b^* \Psi_a dV = \delta_{ab} \quad (10)$$

normálási feltételnek is teljesülnie kell, ahol  $*$  a komplex konjugáltat jelenti, míg  $\delta_{ab}$  a Kronecker-szimbólum. Ez a feltétel a rendszer teljes hullámfüggvényének szokásos normálása. Ha hengerkoordinátákat vezetünk be

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} \Psi^*(E_n) \Psi(E_m) \varrho d\varphi d\varrho dz = \delta_{nm}, \quad (11)$$

és alkalmazzuk a (8) szétválasztást, a  $\psi$ -re az alábbi feltételt kapjuk:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \psi_n^* \psi_m \varrho d\varrho dz = \delta_{nm}. \quad (12)$$

A fentiekben a spintől végig eltekintettünk, mivel ez csak  $+2\omega$ , vagy  $-2\omega$  eltolódást okoz  $E$ -ben.

A probléma asztrofizikai jelentőségéről már volt szó, de a fenti feladat fizikai és matematikai szempontból is érdekes. Ismeretes, hogy (9) tovább már nem szeparálható, s így a diamágnese Coulomb-probléma kétdimenziós sajátérték-feladat (mint ilyen, a legegyszerűbb a kvantummechanikában). A kvantummechanika klasszikus korszakában felírt egyenlet vizsgálata mindmáig nem tekinthető lezártnak a legutóbbi idők igen komoly numerikus és analitikus előrelépései (l. Ruder és tsai 1994, Kravchenko és tsai 1996) ellenére sem. Még valamire érdemes felhívni a figyelmet. A feladat klasszikus megfelelője, a diamágnese Kepler-probléma, a kaotikus rendszerek egyik alapesete. Érdekes volna tudni, hogy mi felel meg a klasszikusan kaotikus dinamikának a kvantummechanika keretei között.

### 3.2. A sajátérték-feladat megoldási módszerei

Mivel a (9) feladat alapvetően kétdimenziós (nemszeparálható), a szokásos megoldási módszerek rendre igen nagy nehézségekbe ütköznek. Röviden összefoglalom a szokásos eljárásokat, azok eredményeit és hiányosságait a jelen feladat szempontjából. Először a kötött állapotok kiszámításával foglalkozom.

a) *Variációszámítás.* Ez a jól ismert, a kvantummechanika kezdetein egyeduralkodó módszer azon alapul, hogy a sajátértéknek extrémális tulajdonságai vannak, vagyis az

$$\frac{\int \Psi^* \hat{H} \Psi dV}{\int \Psi^* \Psi dV} = E$$

energiaintegrál minimális az egzakt  $\Psi$ -vel. Ahhoz, hogy ezt megtaláljuk, feltesszük, hogy a sajátfüggvény  $\Psi(a_1, a_2, \dots)$  alakú, ahol az  $a_i$ -k tetszőleges, jól megválasztott paraméterek. Ha az  $E$  sajátértéknek ezen paraméterekkel alkotott variációját képezzük, akkor ezeknek nullát kell adniuk az extrémális tulajdonság miatt, vagyis

$$\frac{\delta E}{\delta a_i} = 0.$$

Ha ezt az egyenletrendszert megoldjuk, megkapjuk az alapállapot energiáját. A gerjesztett állapotok meghatározásánál azt kell figyelembe venni, hogy a rendszer hullámfüggvényei ortogonálisak egymásra. A magasabban fekvő gerjesztett állapotok esetében az ortogonalizálási feltételek száma nő, és ez numerikusan egyre bonyolultabbá teszi a feladatot.

A variációszámítás mindig csak felső korlátot ad  $E$ -re, de az eljárás konvergenciája nincs bizonyítva! Az  $a_i$  paraméterek kiválasztására sincs általános módszer, holott a számítások hatékonyságát ezek nagyban befolyásolják. A variációs hullámfüggvény igen jól közelíti az egzaktot azokban a tartományokban, ahol a  $\hat{H}$  nagy súlyt ad az energiaiintegrálban. E tartományokon kívül a hullámfüggvény lehet egészen rossz is,

ezért a variációs számítás igazából csak energia-sajátértékek kiszámítására alkalmas. A módszer nem használható a kontinuumban levő állapotok kiszámítására sem. További gond, hogy a variációs számításból kapott  $\Psi$  nagyon gyakran nem formális megoldás. A formális megoldásokkal viszont az eljárás rosszul konvergál.

b) A *diagonalizációs technikák* alapelve a következő. A  $\psi$  sajátfüggvényt

$$\psi(\varrho, z) = \sum_{i,j=0}^{\infty} d_{ij} \bar{f}_i(z) \bar{g}_j(\varrho) \quad (13)$$

alakban keressük, majd ezt az alakot a feladatba visszahelyettesítve, balról rendre beszorozva az összes  $\bar{f}_i$ ,  $\bar{g}_j$ -vel és integrálva a megfelelő változók szerint egy végtelen homogén lineáris egyenletrendszer kapunk a  $d_{ij}$  kifejtési együtthatókra. Ennek az egyenletrendszernek akkor és csak akkor van a triviálistól különböző megoldása, ha az együtthatóiból képzett determináns értéke zérus. Ez csak  $E$  bizonyos diszkrét értékeinél következik be, amelyeket az együtthatómátrix diagonalizálásával lehet megkapni (innen az eljárás neve). A gyakorlatban 30-40 000 elemű mátrixok diagonalizálása manapság megszokott. Ebből a tényből mindjárt következik is a módszer egyik hátránya: a sok ezer tag között elvesz a fizikai tartalom. Igaz, hogy jó sajátérték kapható, de az eljárás mégis inkább numerikus csúcstechnológiának tekinthető, semmint eszköznek a fizikai folyamatok elemzésére. Az eljárás konvergenciája itt sem bizonyított. Továbbá, igen nehéz bármit is mondani a hullámfüggvényről, de valószínűleg igen rossz minőségű azokon a tartományokon kívül, amelyeknek a Hamilton-operátor nagy súlyt ad az energiai integrálban. (A diamágnese Coulomb-problémához matematikailag igen hasonló kvantummechanikai háromtest problémára ismeretes olyan (13) feltevés, teljesen reguláris  $\bar{f}$ ,  $\bar{g}$  függvényekkel, amely olyannyira nem formális megoldás, hogy divergens (Barcza 1984)!) )

c) A *multigrid-módszerek* inkább csak elvi lehetőségek az adott problémában. Nagyon sok rácspont lenne szükséges a megkívánt pontosság eléréséhez. Az ilyen módszerek egyre nagyobb numerikus nehézségekbe ütköznek a magasabban fekvő állapotok esetén.

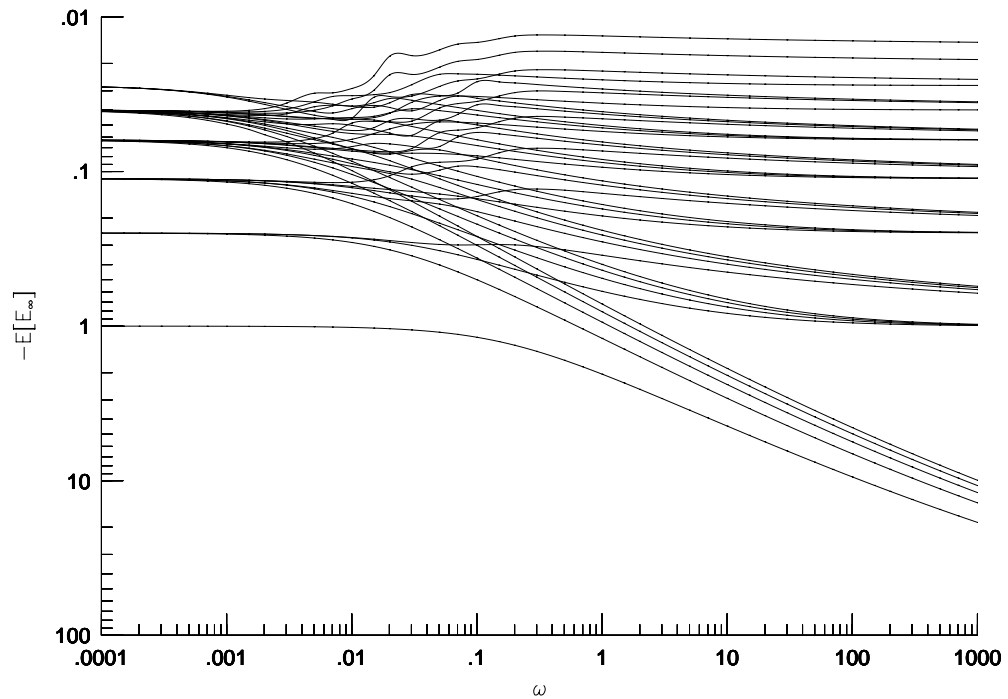
d) A *sajátfüggvény-kifejtések* bizonyultak a legsikeresebb módszernek. Alapfeltevésük szerint a sajátfüggvényt

$$\psi(\varrho, z) = \sum_{i=0}^{\infty} \tilde{f}_i(z) \tilde{\Phi}_i(\varrho) \quad (14)$$

alakban keressük. Itt a  $\tilde{\Phi}_i$  függvényekkel definiált bázis általában valamilyen jól ismert ortogonális függvényrendszerrel azonos, pl. Laguerre-függvények. Az ortogonalizációs eljárással szemben itt együtthatófüggvények vannak, amelyekre csatolt közönséges differenciálegyenlet-rendszer adódik. A megfelelő pontosságú sajátérték kiszámításához itt általában néhány tucat tag szükséges. A tagok száma nagymértékben függ a bázisválasztástól. A jelenleg elérhető legteljesebb munka Ruder és tsai (1994) könyve



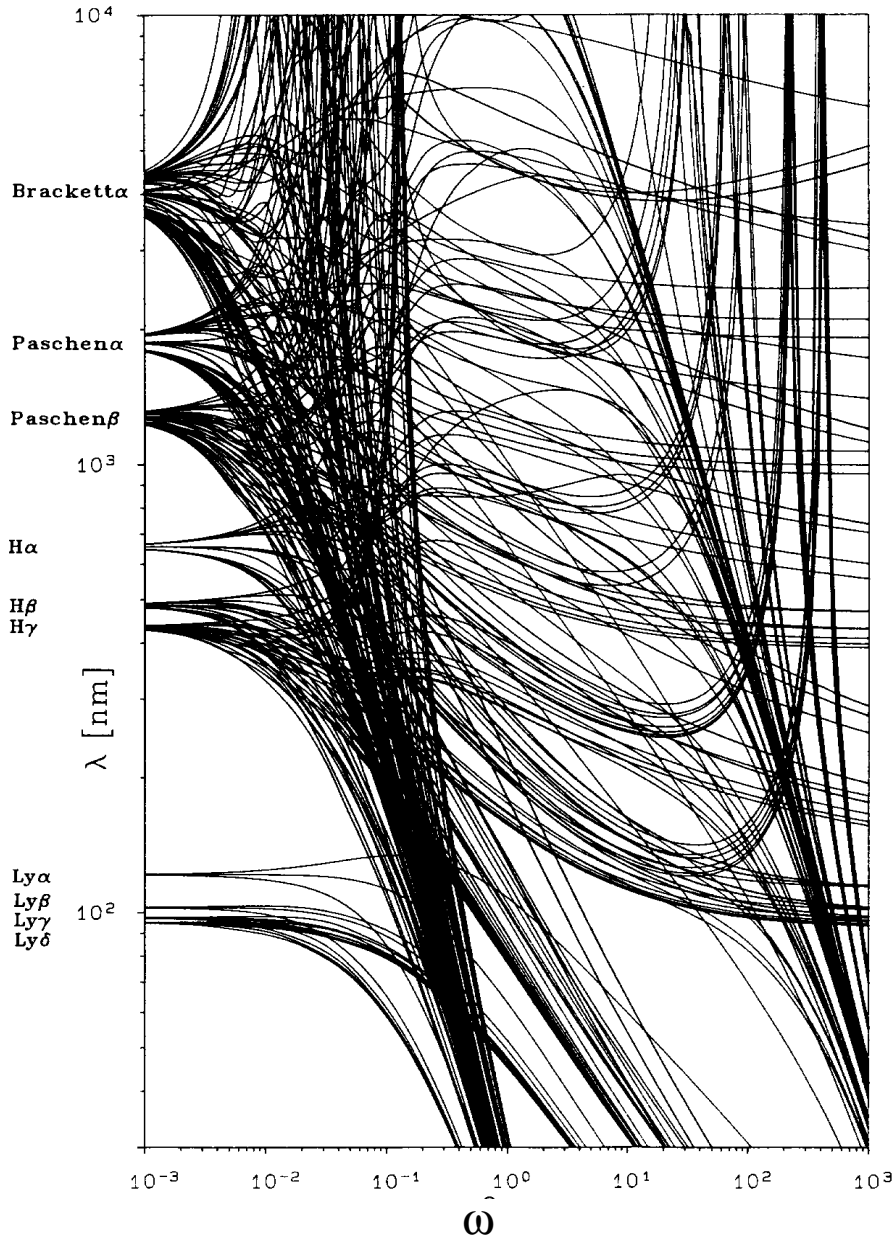
is ezt a módszert használja a alsó állapotokra. A viszonylag kis térerősségekre gömbi koordinátarendszerben Legendre-bázisban, a nagyobb térerősség-tartományban hengerkoordinátákat használva Landau-bázisban számoltak. A 6. ábra ezen munka legfőbb eredményét mutatja: a diamágneses Coulomb-probléma alsó energiasajátállapotainak térerősségtől való függését. Jól látható, hogy a térerősség növelésével a sajátértékek degenerációjának megszűnése egyre könnyebben megfigyelhető, valamint az egész spektrum látványosan összekeveredik az erős keveredési tartomány környékén.



**6. ábra.** A hidrogénatom legalsó kötött állapotainak mágneses tértől való függése.  $\omega$  a Larmor-frekvencia,  $E$  a sajátérték,  $E_\infty = 2\omega(n_3 + 1)$  a Rydberg-energia atomi egységekben. Ruder és tsai (1994) nyomán.

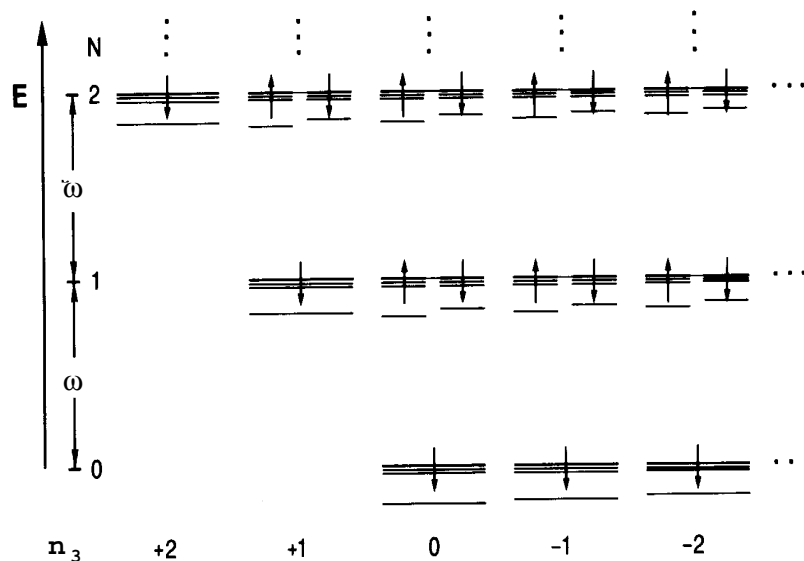
A 7. ábra – amely már a tényleges spektrumot tartalmazza – még jobban érzékelteti mindezt. Kis térerősség-tartományban még jól megfigyelhető a jól ismert Zeeman-felhasadás, a térerősség növekedésével azonban a színek a felismerhetetlenségig összekavarodik. Még egy dolog figyelemre méltó a fenti két ábrával kapcsolatban: az óriási befektetett munka (mintegy száz ember kb. 15 évi munkája és több mint 2000 óra tiszta futási idő egy Cray YMP 2000 szuperszámítógépen) is csak a legalsó néhány

állapot kiszámolásához volt elegendő. A Lyman-sorozatból 4, a Balmer-sorozatból 3, a Paschen-sorozatból 2 és a Brackett  $\alpha$  vonal végigkövetése volt lehetséges.



**7. ábra.** A hidrogénatom vonalas spektrumának függése a mágneses tértől. Az ábrán a mágneses térerősséget az  $\omega$  Larmor-frekvenciával jellemezzük. Az ábrán az összes eddig kiszámított vonal szerepel, kivéve az azonos főkvantumszámú állapotok közti lehetséges átmenetekhez tartozókat. Ruder és tsai (1994) alapján.

A fehér törpékre szerencsére a kisebb térerősségek jellemzőek, így a legerősebb vonalaik azonosítása már a számolások viszonylag korai fázisában lehetségessé vált és látványos eredményt hozott (l. 2. ábra spektrum-azonosítását).



**8. ábra.** A diamágneses Coulomb-probléma sematikus sajátérték-spektruma egy nagy  $\omega$  értéknél. Látható a szigorúan kötött, az autoionizálódó állapotok, a Landau-szintek, ill. az ezekhez tartozó rezonanciák rendszere. A nyilak a spin  $z$  irányát jelzik ( $s_z = \pm 1$ ).

A szigorú értelemben vett kötött állapotokon túl az ionizációs küszöb fölött is léteznek normálható sajátfüggvényű állapotok (l. 8. ábra). Az összes  $n_3 > 0$  kvantumszámú állapot lehet ilyen. Ezek az autoionizálódó állapotok. Sajátértékeik kiszámításával nem kell külön foglalkozni, mivel ezekre igaz, hogy  $E(+n_3) = E(-n_3) + 4n_3\omega$ .

Az energianívók egy további alrendszere az ionizációs küszöb fölött fekvő ún. gerjesztett Landau-szintek és a hozzájuk tartozó termek, amelyeket a Coulomb-potenciál okoz. Ezek a szintek az opacitásba szintén beleszólhatnak mint rezonanciák. Több oldalról indult meg a munka ezen szintek meghatározására. A főbb módszereket csak egy-egy mondatban ismertetem, mivel ezekkel az állapotokkal a későbbiekben ez a munka sem foglalkozik. Az első próbálkozás közvetlen integrálással történt.

a) *Közvetlen integrálás* alatt azt értem, hogy a (9) egyenletet oldjuk meg a (12) feltétel nélkül. Pontosabban a sajátfüggvény-kifejtési eljárásból kapott csatolt differenciálegyenlet-rendszerben az első Landau-szinthez tartozó állapotokra 1, a másodikonál 2 stb. nyitott csatornát teszünk fel. Ezekre nem igaz a négyzetesen integrálhatóság, míg a többi csatornára igen. Máig az egyetlen ilyen felfogású publikált

munka Friedrich és Chu (1983) cikke. Az általuk használt végtelenbeli határfeltétel azonban nagy valószínűséggel hibás.

*b) R-mátrix formalizmus.* Ez a felfogás a pozitív energiájú állapotok kiszámítását szórési feladatnak fogja fel. Az azoknál szokásos S-mátrixos leírást lehet itt is módosítani. A legújabb ilyen munka az adott feladatra Greene és Wang (1991) cikke. Ezzel a kezelési móddal azonban van néhány gond. Nem világos, hogy erős mágneses tér esetén a be- és kifutó hullámok mivel azonosak. Továbbá, nem világos a kapcsolat az elektronszórési és a fotonszórési rezonancia között.

*c) A komplex rotációs módszer* jelenleg a legnépszerűbb. Ennek lényege, hogy a Hamilton-operátorban és a hullámfüggvényben egyaránt a térkoordinátákat ( $r$ ) formálisan az  $re^{i\theta}$  kifejezéssel helyettesítjük. Ennek az lesz a következménye, hogy az így kapott egyenlet sajátértékei komplexek lesznek. Zérus imaginárius részű komplex sajátértékként megkapjuk persze a korábbról jól ismert kötött állapotok energiáit is. A valódi komplex sajátértékekhez tartoznak a rezonanciák. Sajátfüggvényeik komplex argumentumú, négyzetesen integrálható függvények. A formális hasonlóság miatt a valódi kötött állapotok kiszámítására használt módszerek ezek után itt is működnek (l. Merani és tsai 1995).

#### 4. A feladat Liu-Starace bázisban

A fent elmondottakból világos, hogy a viszonylag alacsonyan fekvő, kötött állapotok kiszámítására a különböző sajátfüggvény-kifejtések a legmegfelelőbbek. A módszer hatékonyságát nagyban befolyásolja a bázis megválasztása.

A (9) feladat nemszeparábilis. Ha egyszerűsíteni akarjuk a numerikus kezelést – és az adott feladatban a közönséges differenciálegyenletekre vonatkozó problémákat egyszerűbbnek tartjuk – mégis fel kell tenni valamilyen kvázi-szeparabilitást. Ennek több módja lehetséges. A legegyszerűbb esetben a (14) feltevessel élünk. Adiabátikus esetben (amikor a végtelen összeget egyetlen taggal közelítjük) ez a feltevés a teljes szeparabilitással egyenértékű. Behelyettesítés után a  $\tilde{\Phi}_i$ -re adódó rekurziós relációból felismerhető, hogy

$$\tilde{\Phi}_i(\varrho) = \varrho^{n_3} e^{-\frac{\omega \varrho^2}{2}} L_{i+n_3}^{n_3}(\omega \varrho^2), \quad (15)$$

ahol  $L_{i+n_3}^{n_3}$  a megfelelő asszociált Laguerre-függvény (nem azonos az általánosított Laguerre-függvénnyel! Az asszociált Laguerre-függvény definíciója megtalálható Pauling és Wilson 1935 klasszikus munkájában.). Ezt a bázist szokás Landau-bázisnak is hívni. Az  $\tilde{f}_i(z)$  függvényekre adódó csatolt differenciálegyenlet-rendszerben a csatolás csak a  $f_i$  függvényektől függ és a csatolómátrix-elemek is egyszerűen számolhatók, mivel ezek Laguerre-függvényeket tartalmazó integrálok. Ezek a fenti bázisválasztás nagy előnyei. Hátránya (mint azt látni fogjuk), hogy a jó konvergenciához a sorfejtésből viszonylag sok tagot kell figyelembe venni.

Lehetségesek általánosabb bázisválasztások is, amelyek már a bázisfüggvények felírásakor is figyelembe veszik a nonszeparabilitást. Az egyik ilyen

$$\psi(\varrho, z) = \sum_{i=0}^{\infty} \tilde{b}_i(\varrho) \Xi_i(\varrho, z). \quad (16)$$

Itt a  $\Xi_i(\varrho, z)$  bázisfüggvényekre egy paraméteres sajátérték-probléma adódik és a csatolt egyenletrendszer is sokkal bonyolultabb, mint az előbbi esetben. Belátható az is, hogy a (16) feltevés csak  $\omega \rightarrow 0$  esetén jó igazán. Továbbá, a bázisegyenletnek a diszkrét mellett folytonos spektruma is van, ami további bonyodalmakat okozhatna a numerikus számolás során. Így a (16) által definiált bázissal nem foglalkozunk a továbbiakban.

A (16)-hoz hasonlóan általános bázist kapunk, ha Liu és Starace (1987) nyomán feltesszük, hogy a megoldás

$$\psi(\varrho, z) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n(z) \hat{\Phi}_n(\varrho, z) \quad (17)$$

alakban kereshető. Feltesszük, hogy minden rögzített  $z$ -re a  $\hat{\Phi}_n(\varrho, z)$  bázisfüggvény korlátos a  $\varrho$  változóban és az  $n$ -ik sajátfüggvény az  $n$ -ik  $\mu_n(z)$ -vel jelölt sajátértékhez

tartozik az alábbi feladatban:

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial \varrho^2} + \frac{1}{\varrho} \frac{\partial}{\partial \varrho} - \frac{n_3^2}{\varrho^2} + \frac{2Z}{(\varrho^2 + z^2)^{1/2}} - \omega^2 \varrho^2 + \mu_n(z) \right] \hat{\Phi}_n(\varrho, z) = 0, \quad 0 < \varrho < \infty. \quad (18)$$

A (18) sajátérték-feladat sajátfüggvényeit rögzített  $z$  esetén Liu–Starace bázisnak fogjuk hívni, mivel a függvények teljes ortogonális rendszert alkotnak. A bázis legyen 1-re normált az

$$\int_0^\infty \hat{\Phi}_{n'} \hat{\Phi}_n \varrho d\varrho \equiv (\hat{\Phi}_{n'}, \hat{\Phi}_n) = \delta_{n'n} \quad (19)$$

képletnek megfelelően. Ebben az esetben a (9) és (18) egyenletekből következik, hogy az  $\{f_n(z)\}_{n=0}^\infty$  függvényeknek az

$$\begin{aligned} \frac{d^2 f_n}{dz^2} + [2E^* - \mu_n(z)] f_n + \sum_{n'=0}^\infty [A_{nn'} f_{n'} + B_{nn'} \frac{df_{n'}}{dz}] &= 0, \\ -\infty < z < \infty, \quad n = 0, 1, \dots, \end{aligned} \quad (20)$$

végtelen, közönséges differenciálegyenlet-rendszert kell kielégíteniük, ahol

$$A_{nn'}(z) = \left( \hat{\Phi}_n, \frac{\partial^2 \hat{\Phi}_{n'}}{\partial z^2} \right), \quad B_{nn'}(z) = 2 \left( \hat{\Phi}_n, \frac{\partial \hat{\Phi}_{n'}}{\partial z} \right) \quad (21)$$

és a (19) ortonormáltság miatt  $B_{nn} = 0$ ,  $B_{nn'} = -B_{n'n}$ . Mint azt Liu és Starace (1987) megmutatta a (17) feltevés adiabatikus közelítésben is igen jó eredményeket ad, összehasonlítva más, egyszerűbb bázisválasztást használó számolásokkal. Azokban tucatnyi tagot figyelembe kellett venni a megfelelő pontossághoz, míg a Liu–Starace bázisban már az adiabatikus közelítés is kielégítő volt. A Liu–Starace bázis viselkedését nemadiabatikus közelítésben eddig senki nem vizsgálta. Ennek oka talán abban kereshető, hogy a bázisfüggvények csak numerikusan állíthatók elő, illetve a csatolt egyenletrendszerben a csatolás  $f_n(z)$  deriváltakat is tartalmaz és ezek – ha a szokásos módszereket használjuk – bonyolulttá teszik a numerikus kezelést.

Az általunk alkalmazott módszer azonban megengedi, hogy a (9) megoldását szétválasszuk két lépésre. Először csak az  $E^*$  sajátértékeket keressük meg. Mint a későbbiekben látni fogjuk, a  $\psi$  sajátfüggvények meghatározása a sajátértékek ismeretében egy külön lépésben történhet. Ez eljárásunkat minden szokásos módszertől megkülönbözteti. Igazából a függvények értékeire nincs is szükségünk, mivel az átmeneti valószínűségek is megkaphatók közvetlenül a sajátértékek ismeretében! A továbbiakban megmutatjuk, hogy sem a (20) csatolt egyenletrendszer felírásához, sem megoldásához ( $E^*$  meghatározásához) nincs szükség a  $\Phi_n(\varrho, z)$  bázisfüggvények értékeire, valamint megmutatjuk, hogy a használt módszer numerikusan is jól viselkedik. Ezzel bázisválasztásunk bonyolultságát – azaz azt, hogy ezek a függvények csak numerikusan adhatók meg – megszüntetjük. Mindezek együtt azt mutatják, hogy a kifejlesztett új eljárásunk majdnem minden területen jobb, mint a korábbiak.

A következőkben erősen támaszkodunk a szinguláris peremérték-problémák elméletében elért egyes matematikai eredményekre. Esetünkhöz az elvi alapok és a hibabecslések a reguláris szingularitás esetére Balla (1977, 1988) cikkeiben találhatók. Az irreguláris szingularitásra vonatkozó fölhasznált eredményeket Birger és Lyalikova (1965), Abramov és Balla (1993) dolgozatai tartalmazzák. A szinguláris sajátérték-problémákat áttekintő módon tárgyalják Abramov és tsai (1980). A fent idézett specifikus problémákat (pl. sajátértékek és sajátfüggvények kiszámítása, sajátfüggvények alkotta kvadratikus funkcionálok meghatározása) egyesítő általános elmélet a skaláris Schrödinger-egyenletre Kitoroage és tsai (1987) összefoglaló dolgozatában található, mind reguláris, mind szinguláris esetre. Az ismertetendő módszer teljesen új a fenti (9) egyenlet megoldásában és a (20)-hez szükséges kvadratikus funkcionálok kiszámításában is.

#### 4.1. A bázisegyenlet

Az  $E$  sajátértékek meghatározásához – a (20) egyenletrendszer felírásához – ismernünk kell a  $\mu_n(z)$  és az  $A_{nm}(z)$ ,  $B_{nm}(z)$  függvények értékeit. Mivel ezeket a (18) bázisegyenlet (és a (19) feltétel) meghatározza, először ezzel foglalkozunk.

A  $\Phi(\varrho, z) = \sqrt{\varrho} \hat{\Phi}(\varrho, z)$  transzformáció után a (18) egyenlet az alábbi alakot ölti

$$\Phi''(\varrho, z) + [q(\varrho, z) + \mu(z)]\Phi(\varrho, z) = 0, \quad (22)$$

ahol ' a  $\partial/\partial\varrho$  deriválást jelenti,

$$q(\varrho, z) = \frac{\frac{1}{4} - n_3^2}{\varrho^2} + \frac{2Z}{(\varrho^2 + z^2)^{1/2}} - \omega^2 \varrho^2. \quad (23)$$

A (22) feladat egy paraméteres ( $z$ ), másodrendű, szinguláris peremérték-problémára vonatkozó sajátérték-feladat. A feladat összetettséget több lépésben csökkentjük. Először a szinguláris peremfeltételeket vizsgáljuk meg.

A numerikus számítások során a szinguláris peremfeltételek kiszabásának több módja lehetséges. A legegyszerűbb az, amikor az egzaktul csak a szinguláris helyen igaz feltételt a feladat szempontjából megfelelően választott, de véges értéknél szabjuk ki. Ez a közelítés azon túl, hogy numerikusan néha szükségtelenül nagy integrálási intervallumot igényel, elvi szempontból is kifogásolható, hiszen az eredeti feladatot attól szerkezetében különböző (reguláris) feladattal helyettesíti, amelynek a megoldásai nem csak a szinguláris hely közelében fognak különbözni az eredeti feladatétól.

Egy másik lehetséges módszer, hogy a megoldást konvergens hatványsor formájában keressük a szinguláris hely környékén. Az egyenletből meghatározzuk a hatványsor szükséges együtthatóit, majd a numerikus integrálást ebből a megoldásból (a konvergenciasugárnak megfelelő reguláris pontból) indítjuk. Sajnos nem garantálható, hogy a feltételezett sorfejtések létezzenek, illetve sokszor csak rosszul számolható általánosított (pl. törtkitevőjű hatványokat is tartalmazó) sorfejtéseket kapunk.

A fenti módszerek helyett tegyük a következőket! Először foglalkozzunk a  $z \neq 0$  esettel. A  $q(\varrho, z)$  potenciál felírható az alábbi alakban:

$$\begin{aligned} q(\varrho, z) &= \frac{1}{\varrho^2} \sum_{i=0}^{\infty} q_i \varrho^{2i}, \quad \text{ha} \quad \frac{\varrho}{z} < 1, \\ q(\varrho, z) &= \varrho^2 \sum_{i=0}^{\infty} \tilde{q}_i \varrho^{-i}, \quad \text{ha} \quad \frac{\varrho}{z} > 1, \end{aligned} \quad (24)$$

ahol  $q_0 = \frac{1}{4} - n_3^2$ ,  $q_1 = \frac{2Z}{z}$ ,  $q_2 = -\frac{Z}{z^3} - \omega^2$ ,  $q_i = \frac{Zc_{i-1}}{z^{2i-1}}$ , ha  $i \geq 3$  és

$$\tilde{q}_0 = -\omega^2, \quad \tilde{q}_1 = \tilde{q}_2 = 0, \quad \tilde{q}_3 = 2Z, \quad \tilde{q}_4 = \frac{1}{4} - n_3^2, \quad \tilde{q}_{2i+1} = 2Zc_{i-1}z^{2(i-1)}, \quad \text{ha} \quad i \geq 2.$$

Itt  $c_0 = 1$ ,  $c_1 = -\frac{1}{2}$  és  $c_i = -\frac{1}{2} \left[ \sum_{l=1}^{i-1} c_l c_{i-l} + \sum_{l=0}^{i-1} c_l c_{i-l-1} \right]$  ha  $i \geq 2$ .

A megfelelő  $q_i$  és  $\tilde{q}_i$  együtthatók a (24) sorfejtéseknek a (22) egyenletbe való beírásával adódtak. Innentől kezdve, ha ez nem okoz zavart, a  $z$  argumentumot elhagyjuk.

A (22) egyenlet keresett  $\Phi$  megoldása korlátos  $\varrho$  szerint a  $(0, \infty)$  intervallum mindkét végpontjában (a többi megoldás nem korlátos). Ezzel az állítással ekvivalens az, hogy

(i) a keresett megoldásra minden elegendően kicsi  $\varrho$  ( $\varrho \ll z$ ) esetén

$$\varrho \Phi'(\varrho) = \gamma(\varrho) \Phi(\varrho), \quad (25)$$

$$\text{ahol} \quad \gamma = \sum_{i=0}^{\infty} \gamma_i \varrho^{2i}, \quad (26)$$

$$\gamma_0 = \frac{1}{2} + |n_3|, \quad \gamma_1 = -\frac{q_1 + \mu}{2(1 + |n_3|)}, \quad \gamma_i = -\frac{q_i + \sum_{l=1}^{i-1} \gamma_l \gamma_{i-l}}{2(i + |n_3|)}, \quad \text{ha} \quad i \geq 2 \quad (27)$$

(Balla 1977).

(ii) a keresett megoldásra tetszőleges, elég nagy  $\varrho$  esetén ( $\varrho \gg z$ ),

$$\Phi'(\varrho) = \varrho \beta(\varrho) \Phi(\varrho), \quad (28)$$

$$\text{ahol} \quad \beta \sim \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\beta_i}{\varrho^i}, \quad (29)$$

$$\beta_0 = -\omega, \quad \beta_1 = 0, \quad \beta_2 = \frac{\mu}{2\omega}, \quad \beta_i = \frac{1}{2\omega} \left[ \tilde{q}_i + \sum_{l=0}^{i-2} \beta_{l+1} \beta_{i-l-1} - (i-2) \beta_{i-2} \right], \quad \text{ha} \quad i \geq 3, \quad (30)$$

Birger és Lyalikova (1965) nyomán. Így, ha egy kis  $\varrho = \varrho_0$ -t rögzítünk (25)-ben és egy nagy  $\varrho = \varrho_\infty$ -t (28)-ban, akkor egy a (22) egyenlettel a  $[\varrho_0, \varrho_\infty]$  intervallumon ekvivalens sajátérték-problémát kapunk. A rögzített végpontokban határfeltételül (25) és (28)



szolgál. Ez a feladat most már mentes a szingularitásoktól. Más szavakkal: a szinguláris problémát egy véges intervallumon vele *ekvivalens* problémává transzformáltuk. Azaz a (25) és (28) alakú határfeltétel akkor és csak akkor létezik, ha a keresett (korlátos) megoldás létezik. Ez matematikailag egzakt, ugyanakkor numerikusan is pontosabb, mint a fentebb említett „szokásos” kezelések.

Ezek után a következő lépés a (22), (25), (28) peremértékprobléma numerikus integrálása. Mi a feladatot kezdetiérték-feladatokra vezetjük vissza és azokat integráljuk. A megfelelő kezdetiérték-feladatok felírásáról és az alkalmazott módszer általános jellemzőiről l. a 8.1. függelék.

Definiáljuk implicit módon a  $r(\varrho)$ ,  $\Theta(\varrho)$  függvényeket a

$$\Phi(\varrho) = \frac{r(\varrho)}{w(\varrho)} \sin \Theta(\varrho), \quad \Phi'(\varrho) = w(\varrho)r(\varrho) \cos \Theta(\varrho) \quad (31)$$

relációval. Tulajdonképpen, (31) egy módosított Prüfer-transzformáció (l. pl. Pryce 1993), ahol a  $w(\varrho)$  egy majdnem tetszőleges skálázó függvény. Mindössze annyit kötünk ki, hogy a  $\lim_{\varrho \rightarrow 0} w(\varrho) = w_0$  és a  $\lim_{\varrho \rightarrow \infty} w(\varrho) = w_\infty$  egyaránt létezzenek (legyenek véges értékek). A  $w(\varrho)$  skálázó függvény arra szolgál, hogy az alább bevezetett egyenleteknek kellően sima megoldásuk legyen. A skálázófüggvény konkrét alakja a  $q$  potenciáltól függ. Az alacsonyabb energiájú állapotok számolásakor  $w(\varrho) \equiv 1$  is megfelelő választás.

Ha a (31) relációt visszahelyettesítjük a (22) egyenletbe, egyenletet kapunk a  $\Theta$  fázisra és az  $r$  amplitúdóra

$$\Theta' = w^2 \cos^2 \Theta + \frac{1}{w^2} [q(\varrho, z) + \mu] \sin^2 \Theta + \frac{(w^2)'}{w^2} \frac{\sin 2\Theta}{2}, \quad (32)$$

$$r' = -v(\varrho, z)r, \quad (33)$$

ahol

$$v(\varrho, z) = \left[ \frac{q(\varrho, z) + \mu(z)}{w^2(\varrho)} - w^2(\varrho) \right] \frac{\sin 2\Theta}{2} + \frac{[w^2(\varrho)]'}{w^2(\varrho)} \frac{\cos 2\Theta}{2}. \quad (34)$$

A (25) feltételt véve  $\varrho_0$ -nál ill. (28)-t  $\varrho_\infty$ -nél kapjuk, hogy

$$\Theta(\varrho_0) = \arctan \frac{\varrho_0 w^2(\varrho_0)}{\gamma(\varrho_0)} \quad (35)$$

és

$$\Theta(\varrho_\infty) = -\arctan \frac{\varrho_\infty \beta(\varrho_\infty)}{w^2(\varrho_\infty)} + (n + \frac{1}{2})\pi. \quad (36)$$

Mint korábban is, az alsó képletben szereplő  $n$  a sajátfüggvény sorszáma, amely egyben zérushelyeinek számát mutatja. (A  $\Theta$  és  $r$  függvények  $n$  indexét nem írtuk ki.) Legyen a (32) egyenlet megoldása a (35) kezdeti feltétellel  $\Theta_I(\varrho)$  és a (36) feltétellel  $\Theta_R(\varrho)$ . Ezzel már meghatároztuk tehát azt a két Cauchy-feladatot, amelynek megoldása megadja a

$\mu_n$  sajátértékeket: ha ugyanis  $\mu$  sajátérték, akkor egy tetszőlegesen rögzített közbülső  $0 < \varrho = \varrho_c < \infty$  pontban a problémák megoldásai egybeesnek, azaz  $\Theta_l(\varrho_c) = \Theta_r(\varrho_c)$ . Mivel mindkét kezdetiérték-probléma megoldása monoton a  $\mu$  paraméterben, minden egyes  $\mu_n$  sajátérték megkapható egy egyszerű biszekciós algoritmussal, kiindulva egy intervallumból, amely tartalmazza a sajátértéket. (Az eredményeket a 4.4 fejezet tartalmazza.)

A sajátértékek meghatározása után térjünk rá az  $r(\varrho)$  amplitúdó egyenletre. A (33)-es egyenlet lineáris. Valójában nem is egy, hanem két függvényünk van  $r_l(\varrho)$  és  $r_r(\varrho)$  az  $r_l(\varrho_c) = r_r(\varrho_c) = r_c$  csatoló feltétellel, amely a megfelelő l, r indexű (33) egyenletnek a kezdeti feltételeket szolgáltatja. Az  $r_c$  értéket egyértelműen meghatározza a sajátfüggvényre vonatkozó normálási feltétel. Fontos kiemelni, hogy a (33) egyenlet megoldására sem a  $\mu_n$  sajátértékek kiszámításánál, sem a későbbi fejezetekben szereplő  $A_{nn'}$  és  $B_{nn'}$  illetve  $E^*$  számolásánál sincs szükség. Amire szükségünk lesz, az mindössze az  $r_c$  értéke.

Mindazonáltal, ha a  $\Phi$  függvények mégis érdekesek lennének valamilyen okból megadom ezek célszerű kiszámítási módját. Vezessük be  $\phi = \Theta + \pi/2$  függvényt! Ekkor

$$\Phi(\varrho) = -\frac{r(\varrho) \sin \Theta(\varrho)}{w(\varrho) \sin[\Theta(\varrho) - \phi(\varrho)]}$$

alakban kapható meg. A szükséges egyenletek ekkor a  $\phi$ -re és  $r$ -re (32), ill. (33) egyenletekből kaphatók. Az integrálást a  $\varrho_c$  közbülső ponttól a két végpont felé kell végezni.

Ez után a közbevetés után folytassuk tárgyalásunkat:  $r_c$  meghatározását sem úgy végezzük, ahogyan az szokásos, vagyis a nemnormált sajátfüggvények normálásával egy numerikus integrálás segítségével. Mi az integrált két részre bontjuk, követve Kitoroage és tsai (1987) ajánlását. Vezessük be a  $h_l(\varrho)$ ,  $h_r(\varrho)$  függvényeket úgy, hogy

$$\int_0^{\varrho} \Phi^2(\xi, z) d\xi = r_l^2(\varrho, z) h_l(\varrho, z) \quad \text{és} \quad \int_{\varrho}^{\infty} \Phi^2(\xi, z) d\xi = -r_r^2(\varrho, z) h_r(\varrho, z). \quad (37)$$

Felhasználva (33)-t (37) deriválása a (33)-t a

$$h'_i(\varrho) = \frac{1}{w^2(\varrho)} \sin^2 \Theta_i(\varrho) + 2v_i(\varrho) h_i(\varrho), \quad i = l, r \quad (38)$$

egyenletekre vezet. Nyilvánvaló, hogy  $\lim_{\varrho \rightarrow 0} r_l^2 h_l = 0$ , amiből következik, hogy  $\lim_{\varrho \rightarrow 0} h_l = 0$ . Belátható, hogy

$$h_l(\varrho) = \sum_{j=1}^{\infty} h_l^{(j)} \varrho^j$$

és azt kapjuk, hogy  $h_l^{(1)} = h_l^{(2)} = 0$ ,  $h_l^{(3)} = w_0^2 / [\gamma_0^2 (2\gamma_0 + 1)]$  ahol figyelembe vettük a (26) és (27) összefüggést. Másrészt,  $h_r(\varrho)$  korlátos marad, ha  $\varrho \rightarrow \infty$ . Az is bizonyítható,

hogy

$$h_r(\varrho) \sim \varrho^{-6} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{h_r^{(j)}}{\varrho^j}$$

és a (29), (30) összefüggések segítségével kapjuk, hogy  $h_r^{(0)} = w_\infty^2/(2\beta_0^3)$ . Tehát, közelítéseink vannak a  $h_l(\varrho_0)$ ,  $h_r(\varrho_\infty)$  értékekre. Ezekkel a kezdeti értékekkel megfogalmazhatunk egy kezdetiérték-problémát  $h_l, h_r$ -re, amelyet aztán a stabil irányba kell integrálni. Nevezetesen  $h_l$ -t  $\varrho_0$ -tól, míg  $h_r$ -t  $\varrho_\infty$ -tól egy belső pontig ( $\varrho_c$ -ig) kell integrálni. A (19) ortonormálási feltételből és a (37) egyenletből következik, hogy

$$\int_0^\infty \Phi^2(\xi, z) d\xi = r_l^2(\varrho, z) h_l(\varrho, z) - r_r^2(\varrho, z) h_r(\varrho, z) = 1. \quad (39)$$

A (38) egyenletekre vonatkozó numerikus integrálásokat elvégezve, és a (39) összefüggést egy közös  $\varrho_c$  pontban felírva a

$$r_c = [h_l(\varrho_c) - h_r(\varrho_c)]^{-1/2} \quad (40)$$

képlethez jutunk. Újból megjegyzendő, hogy a normálás anélkül történik, hogy a függvényt ténylegesen kiszámolnánk és aztán numerikusan normálnánk. A normáláshoz csak a sajátértékre van szükség. (A következő fejezetben a fenti kifejezésekben egy újabb alsó indexet is bevezetünk, amellyel azt jelezzük, hogy melyik sajátértékhez tartozó  $r_c$ -ről van szó.)

Térjünk át most a  $z = 0$  esetre. Ekkor

$$q(\varrho, 0) = \frac{\frac{1}{4} - n_3^2}{\varrho^2} + \frac{2Z}{\varrho} - \omega^2 \varrho^2.$$

Ahhoz, hogy a fenti eljáráshoz való hasonlóság kitűnjék, hasznosak a következő alakok:

$$q(\varrho, 0) = \frac{1}{\varrho^2} \sum_{i=0}^4 q_i \varrho^i, \quad q(\varrho, 0) = \varrho^2 \sum_{i=0}^4 \tilde{q}_i \varrho^{-i}, \quad (41)$$

ahol  $q_0 = \frac{1}{4} - n_3^2$ ,  $q_1 = 2Z$ ,  $q_2 = q_3 = 0$ ,  $q_4 = -\omega^2$  ( $q_i = 0$ ,  $i > 4$ ) és

$$\tilde{q}_0 = -\omega^2, \quad \tilde{q}_1 = \tilde{q}_2 = 0, \quad \tilde{q}_3 = 2Z, \quad \tilde{q}_4 = \frac{1}{4} - n_3^2 \quad (\tilde{q}_i = 0, \quad i > 4).$$

Vegyük észre, hogy ellentétben (24)-gyel  $\varrho \ll 1$  esetén  $\varrho$  páratlan hatványai is megjelennek. Ezért a (25) reláció ugyan igaz marad, de (26)-ot az alábbi sorfejtés váltja fel: helyettesítendő:

$$\begin{aligned} \gamma = \sum_{i=0}^{\infty} \gamma_i \varrho^i, \quad \gamma_0 = \frac{1}{2} + |n_3|, \quad \gamma_1 = -\frac{2Z}{1 + |n_3|}, \quad \gamma_2 = -\frac{\gamma_1^2}{2 + |n_3|}, \\ \gamma_3 = -\frac{2\gamma_1\gamma_2}{3 + |n_3|}, \quad \gamma_4 = \frac{\omega^2 - \sum_{l=1}^3 \gamma_l \gamma_{4-l}}{4 + |n_3|}, \quad \gamma_i = -\frac{\sum_{l=1}^{i-1} \gamma_l \gamma_{i-l}}{i + |n_3|}. \end{aligned} \quad (42)$$

(A  $z = 0$  és  $z \neq 0$  eset között az elmélet szempontjából ez a lényeges különbség, nem pedig  $q$  sorfejtésének végtelen ill. véges volta. Az általános állítás azt mondja ki, hogy ha  $q$  sorfejtése  $q(\varrho) = 1/(\varrho^2) \sum_{i=0}^{\infty} q_i \varrho^i$ , akkor  $\gamma = \sum_{i=0}^{\infty} q_i \gamma^i$  alakú. Speciális esetben, ha  $q_{2l+1} = 0$  minden  $l = 0, 1, \dots$ -ra, akkor  $\gamma_{2l+1} = 0$  is fennáll.)

Elegendően nagy  $\varrho$ -ra ( $\varrho \gg 1$ ), a (28) relációk változatlanok maradnak, eltekintve néhány együttthatótól (30)-ban, amelyeknél  $\tilde{q}_i = 0$ ,  $i > 4$  esetén. Egyébként minden, amit leírtunk a korábbiakban, igaz marad a  $z = 0$  esetben is. A fentiekben leírt módszer alapelvei Abramov és tsai (1980) cikkében találhatók.

A (22) típusú sajátérték-egyenletek megoldásában a szokásos módszerekkel összevetve a fentieket a következők történtek: [1] szinguláris probléma helyett egy adott intervallumon ezzel ekvivalens, reguláris problémát vizsgáltunk, [2] másodrendű peremérték-probléma helyett ezzel ekvivalens elsőrendű kezdetiérték-feladatokat oldottunk meg, [3] a sajátfüggvény numerikus normálása helyett is elsőrendű Cauchy-feladatot oldunk meg.

#### 4.2. A csatolómátrixok

Ebben a részben megmutatjuk, hogy (21)-ban szereplő sajátfüggvényekből és azok deriváltjaiból álló  $A_{nn'}$  és  $B_{nn'}$  integrálok direkt kiszámítása kikerülhet. Sőt, a közismerten instabil numerikus deriválások helyett is egy stabil módszert fogunk használni. Továbbá az előző fejezetben leírt normálási eljáráshoz hasonló módon, az integrandusok kiszámítása (pl. a sajátfüggvényeké) itt sem szükséges.

Vezessük be a következő jelöléseket:  $\Omega_p = \partial \Phi_p / \partial z$  és  $\Upsilon_p(\varrho, z) = \partial^2 \Phi_p(\varrho, z) / \partial z^2$ . (22) miatt  $\Omega_p(\varrho, z)$  és  $\Upsilon_p(\varrho, z)$  kielégíti az alábbi egyenleteket

$$\Omega_p''(\varrho, z) + [q(\varrho, z) + \mu_p(z)]\Omega_p(\varrho, z) = -\vartheta_p(z)\Phi_p(\varrho, z) - \frac{\partial q(\varrho, z)}{\partial z}\Phi_p(\varrho, z), \quad (43)$$

$$\begin{aligned} \Upsilon_p''(\varrho, z) + [q(\varrho, z) + \mu_p(z)]\Upsilon_p(\varrho, z) = \\ -2\vartheta_p(z)\Omega_p(\varrho, z) - 2\frac{\partial q(\varrho, z)}{\partial z}\Omega_p(\varrho, z) - \frac{\partial \vartheta_p(z)}{\partial z}\Phi_p(\varrho, z) - \frac{\partial^2 q(\varrho, z)}{\partial z^2}\Phi_p(\varrho, z), \end{aligned} \quad (44)$$

ahol  $\vartheta_p(z) = \partial \mu_p(z) / \partial z$ .

Szorozzuk meg a (43) egyenlet mindkét oldalát  $\Phi_p$ -vel és integráljunk a  $(0, \infty)$  intervallumon. Parciális integrálással, figyelembe véve a (19) ortonormálást a (22) egyenletet, valamint a függvények végpontokbeli viselkedését, azt kapjuk, hogy

$$\vartheta_p(z) = - \int_0^{\infty} \Phi_p^2(\varrho, z) \frac{\partial q(\varrho, z)}{\partial z} d\varrho. \quad (45)$$

Ha (43)-t megszorozzuk  $\Phi_q$ -val, ahol  $q \neq p$ , akkor az előbbi eljárás a következőre vezet:

$$\int_0^{\infty} \Omega_p(\varrho, z)\Phi_q(\varrho, z)d\varrho = \frac{1}{\mu_q(z) - \mu_p(z)} \int_0^{\infty} \Phi_p(\varrho, z)\Phi_q(\varrho, z) \frac{\partial q(\varrho, z)}{\partial z} d\varrho. \quad (46)$$

Ha  $z \neq 0$ , akkor az  $l_1(\varrho, z) = 1/(\varrho^2 + z^2)^{3/2}$ ,  $l_2(\varrho, z) = 1/(\varrho^2 + z^2)^{5/2}$ ,

$$I_{pq}^{(i)}(z) = \int_0^\infty \Phi_p(\varrho, z) \Phi_q(\varrho, z) l_i(\varrho, z) d\varrho, \quad i = 1, 2, \quad (47)$$

$$J_{pq}(z) = \int_0^\infty \Omega_p(\varrho, z) \Phi_q(\varrho, z) l_1(\varrho, z) d\varrho \quad (48)$$

jelölések mellett a (45) és (46) kifejezés leegyszerűsödik az

$$\begin{aligned} \vartheta_p(z) &= 2Zz I_{pp}^{(1)}(z), \\ \int_0^\infty \Omega_p(\varrho, z) \Phi_q(\varrho, z) d\varrho &= \frac{2Zz}{\mu_p(z) - \mu_q(z)} I_{pq}^{(1)}(z), \quad p \neq q, \end{aligned} \quad (49)$$

alakra, amiből nyilvánvaló, hogy

$$\vartheta_p(0) = 0, \quad \int_0^\infty \Phi_p(\varrho, z) \Phi_q(\varrho, z) \frac{\partial q(\varrho, z)}{\partial z} d\varrho = 0. \quad (50)$$

Ugyanezt az eljárást alkalmazva (44)-re ( $z \neq 0$  esetén) némi számolás után arra jutunk, hogy

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \Upsilon_p(\varrho, z) \Phi_q(\varrho, z) d\varrho &= \frac{2Z}{\mu_p(z) - \mu_q(z)} \times \\ &\left\{ I_{pq}^{(1)}(z) + 2z J_{pq}(z) - z^2 \left[ 3I_{pq}^{(2)}(z) + \frac{4Z}{\mu_p - \mu_q} I_{pp}^{(1)}(z) I_{pq}^{(1)}(z) \right] \right\}, \quad q \neq p. \end{aligned} \quad (51)$$

Az ortonormáltság miatt

$$\int_0^\infty \Upsilon_p(\varrho, z) \Phi_p(\varrho, z) d\varrho = - \int_0^\infty \Omega_p^2(\varrho, z) d\varrho \quad (52)$$

azonosság. (Csak a történeti érdekesség kedvéért jegyzem meg, hogy a (45), (46) és (51)-nek megfelelő relációkat általános hullámfüggvényekkel először Feynman (1939) vezetett le.)

Tekintsük először az  $I_{pq}^{(i)}(z)$ ,  $i = 1, 2$ ,  $p, q = 0, 1, \dots$ ,  $z \neq 0$  integrálokat! Kiszámolásuknál hasonló módon járunk el, mint (37) kiszámításánál, s melynek alapjai Kitoroage és tsai (1987) munkájában találhatók. Legyen

$$\begin{aligned} \int_0^\varrho \Phi_p(\xi, z) \Phi_q(\xi, z) l_i(\xi, z) d\xi &= r_{p1}(\varrho, z) r_{q1}(\varrho, z) k_{pq}^{l(i)}(\varrho, z), \\ \int_\varrho^\infty \Phi_p(\xi, z) \Phi_q(\xi, z) l_i(\xi, z) d\xi &= -r_{pr}(\varrho, z) r_{qr}(\varrho, z) k_{pq}^{r(i)}(\varrho, z) \end{aligned} \quad (53)$$

és  $j = l, r$  jelölés mellett kapjuk, hogy

$$k_{pq}^{(ji)'}(\varrho) = [v_p^{(ji)}(\varrho) + v_q^{(ji)}(\varrho)] k_{pq}^{(ji)}(\varrho) + \frac{l_i \sin \Theta_p(\varrho) \sin \Theta_q(\varrho)}{w_p(\varrho) w_q(\varrho)}. \quad (54)$$

Határozzuk meg ehhez a szinguláris problémához a kezdeti értékeket egzakt módon, ahogyan azt a 4.1 részben tettük!  $z \neq 0$  estén ekkor

$$k_{pq}^{l(i)}(\varrho_0) = \frac{\varrho_0^3 w_{p0} w_{q0} l_0^{(i)}}{\gamma_0^2 (2\gamma_0 + 1)} + O(\varrho_0^4), \quad \text{ahol} \quad l_0^{(1)} = \frac{1}{z^3}, \quad l_0^{(2)} = \frac{1}{z^5} \quad (55)$$

$$k_{pq}^{r(1)}(\varrho_\infty) = \frac{\tilde{l}_0^{(1)} w_{p\infty} w_{q\infty} \varrho_\infty^{-6}}{2\beta_0^3} + O(\varrho_\infty^{-7}), \quad (56)$$

$$k_{pq}^{r(2)}(\varrho_\infty) = \frac{\tilde{l}_0^{(2)} w_{p\infty} w_{q\infty} \varrho_\infty^{-8}}{2\beta_0^3} + O(\varrho_\infty^{-9}), \quad \text{és} \quad \tilde{l}_0^{(i)} = 1, \quad i = 1, 2.$$

Könnyen ellenőrizhető, hogy  $I_{pq}^{(2)}(0)$  kiesik.  $I_{pq}^{(1)}(0)$  számolása során az egyetlen különbség a fentiekhez képest, hogy  $k_{pq}^{l(1)}(\varrho_0) = 1/[2\gamma_0^2(\gamma_0 - 1)] + O(\varrho_0)$ .

Végül

$$I_{pq}^{(i)}(z) = [k_{pq}^{l(i)}(\varrho_c) - k_{pq}^{r(i)}(\varrho_c)] r_{pc} r_{qc}. \quad (57)$$

a  $z$  és  $i$  megfelelő értékeire.

Ezután már csak  $J_{pq}(z)$ -t illetve a (52) jobb oldalán álló kifejezést kell kiszámolnunk. Ebből a célból tegyük fel, hogy

$$\Omega_p(\varrho, z) = \sum_{t=0}^{\infty} \chi_{pt}(z) \Phi_t(\varrho, z), \quad \text{ahol} \quad \chi_{pt}(z) = \int_0^{\infty} \Omega_p(\varrho, z) \Phi_t(\varrho, z) d\varrho \quad (58)$$

akkor

$$J_{pq}(z) = \sum_{t=0, t \neq p}^{\infty} \chi_{pt}(z) I_{tq}^{(1)}(z) \quad (59)$$

is fennáll ( $\chi_{pp}(z) = 0$  az ortonormálás miatt). Mindebből közvetlenül adódik, hogy

$$\chi_{pt}(z) = \frac{2Zz}{\mu_p - \mu_t} I_{pt}^{(1)} \quad \text{ha} \quad p \neq t, \quad (60)$$

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} \Omega_p^2(\varrho, z) d\varrho &= \sum_{t=0}^{\infty} \chi_{pt}(z) \int_0^{\infty} \Omega_p(\varrho, z) \Phi_t(\varrho, z) d\varrho \\ &= 4Z^2 z^2 \sum_{t=0, t \neq p}^{\infty} \left[ \frac{I_{pt}^{(1)}(z)}{\mu_p(z) - \mu_t(z)} \right]^2, \end{aligned} \quad (61)$$

$$J_{pq}(z) = 2Zz \sum_{t=0, t \neq p}^{\infty} \frac{I_{pt}^{(1)}(z) I_{tq}^{(1)}(z)}{\mu_p(z) - \mu_t(z)}. \quad (62)$$

Megjegyezzük, hogy  $I_{pq}^{(i)} = I_{qp}^{(i)}$ . A mátrixelemek végső alakjai mindezek után:

$$B_{nn}(z) = 0, \quad B_{nn'}(z) = \frac{4Zz}{\mu_{n'}(z) - \mu_n(z)} I_{nn'}^{(1)}(z) \quad ; \quad n \neq n', \quad (63)$$

$$A_{nn}(z) = -4Z^2 z^2 \sum_{t=0, t \neq n}^{\infty} \left[ \frac{I_{nt}^{(1)}(z)}{\mu_n(z) - \mu_t(z)} \right]^2, \quad (64)$$

$$A_{nn'}(z) = \frac{2Z}{\mu_{n'}(z) - \mu_n(z)} \times \left\{ I_{nn'}^{(1)}(z) - z^2 \left[ 3I_{nn'}^{(2)}(z) + 4Z \left( \frac{I_{nn'}^{(1)}(z)I_{n'n'}^{(1)}(z)}{\mu_{n'}(z) - \mu_n(z)} - \sum_{t=0, t \neq n'}^{\infty} \frac{I_{n't}^{(1)}(z)I_{nt}^{(1)}(z)}{\mu_{n'}(z) - \mu_n(z)} \right) \right] \right\}. \quad (65)$$

(A kiszámolt  $A_{nn'}$ ,  $B_{nn'}$  függvények közül néhánynak a grafikonja megtalálható a 4.4 fejezetben.)

#### 4.3. A csatolt egyenletrendszer

A gyakorlatban a (20) végtelen egyenletrendszer helyett csak egy véges  $N$  méretűre csonkítottal tudunk foglalkozni. Azaz a következő sajátérték-problémát vizsgáljuk  $N$ ,  $N = 1, 2, \dots$  rögzített értékeire:

$$\frac{d^2 F^N}{dz^2} + \mathcal{B}(z) \frac{dF^N}{dz} + [\mathcal{A}(z) - \mathcal{M}(z)] F^N = -2E^{*N} F^N, \quad (66)$$

$$-\infty < z < \infty,$$

ahol  $N = 1, 2, \dots$ , az  $F^N$  függvényvektort korláatosnak tételezzük fel. Az  $F^N(z)$  vektor az  $F^N(z) = [f_0^N(z), f_1^N(z), \dots, f_{N-1}^N(z)]^T$  módon épül fel, ahol  $f_i^N$  az  $N$ . csonkított rendszerhez tartozó  $f_i$ -t jelenti. T-vel jelöljük a vektor transzponáltját, a későbbiekben a mátrixokét is így fogjuk. A  $\mathcal{B}(z)$  antiszimmetrikus mátrix elemei  $B_{nn'}(z)$ ,  $n, n' = 0, \dots, N-1$ , míg az  $\mathcal{A}(z)$  mátrixé az  $A_{nn'}(z)$ ,  $n, n' = 0, \dots, N-1$ . Az  $\mathcal{M}(z)$  mátrix diagonális oly módon, hogy  $\mathcal{M}(z) = \text{diag}[\mu_0(z), \dots, \mu_{N-1}(z)]$ .

(9) és (17) miatt az  $F^N$  sajátvektorok vagy párosak vagy páratlanok. Így, ha  $n_3 \neq 0$ , akkor elegendő a problémát a  $[0, \infty)$  intervallumon vizsgálni. Határfeltételül  $F^N(0) = 0$  adódik a páratlan megoldásokra, míg a párosak esetében  $F^{N'}(0) = 0$ . (Ebben a fejezetben a vessző  $z$  szerinti deriváltat jelent.) Amikor  $n_3 = 0$ , az  $\mathcal{A}$  mátrix szinguláris a  $z = 0$  helyen, ugyanakkor a keresett megoldásoknak regulárisoknak kell lenniük. Ezért ezzel az esettel külön kell foglalkozni. Az intervallum most is redukálható, de csak a  $[z_0, \infty)$ -re, ahol  $0 < z_0 \ll 1$ . Az igazi határfeltételt ekkor a  $z_0$ -ra kellene kiszabni. Szerencsére a rendszer csak gyengén szinguláris a  $z = 0$  pontban, ellentétben például a 4.1 fejezetben tárgyalt esettel, így a  $z = 0$ -ban felírt lineáris feltétel elfogadható marad  $z_0$ -ra is. (Persze ezek közül csak azok, amelyek páros-páratlan megoldásokat szolgáltatnak.) Tehát egy  $z_0$  pontban, amely kellően közel van a  $z = 0$  ponthoz, a határfeltételek az  $F^N(z_0) = 0$  és  $F^{N'}(z_0) = 0$  feltételekkel közelíthetők.

Ezek után redukáljuk a problémát véges intervallumra a skaláris esethez hasonló módon. Amikor  $z \rightarrow \infty$ , az  $\mathcal{A}(z)$  és  $\mathcal{B}(z)$  0-hoz tart  $z$  valamilyen negatív hatványa szerint (l. Barcza 1996), ugyanakkor  $\mathcal{M}(z) = \mathcal{M}_\infty + O(1/z)$ . Tudjuk, hogy a

helyes  $E_k^*$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots$  sajátértékek a nem autoionizálódó állapotokra mindig kisebbek, mint  $\lim_{z \rightarrow \infty} \mu_n(z)/2$ ,  $n = 0, 1, \dots$ . A  $\mu_n(z)$  függvény  $n$  szerint monoton rögzített  $z$ -nél, illetve  $z$  szerint monoton rögzített  $n$ -nél, és tetszőleges  $k$ -ra igaz, hogy  $E_k^* < \lim_{z \rightarrow \infty} \mu_0(z)/2$ . Feltesszük, hogy ugyanez igaz a véges rendszer  $E_k^{*N}$  sajátértékeire is, vagyis hogy a  $\mathcal{M}_\infty - 2E^*I_N$  diagonális mátrix pozitív definit. (Itt  $I$  az egységmátrixot jelenti az alsó index pedig a rendjét jelzi.) Az  $F^N(z)$  megoldás korlátosságából  $z \rightarrow \infty$  esetén következik (lásd Birger és Lyalikova 1965), hogy elegendően nagy  $z$ -nél  $F^{N'}(z) = \alpha(z)F^N(z)$ , ahol  $\lim_{z \rightarrow \infty} \alpha^2(z) = \mathcal{M}_\infty - 2E^*I$ ,  $\alpha_\infty = \lim_{z \rightarrow \infty} \alpha(z)$  pedig negatív definitnek választandó. Ezen összefüggést közelítve használhatjuk az alábbi határfeltételt

$$F^{N'}(z_\infty) = \alpha_\infty F^N(z_\infty), \quad (67)$$

ahol persze  $z_\infty$ -t megfelelően nagyra választottuk. Pontosabb határfeltétel kapható  $F^{N'}(z_\infty) = \tilde{\alpha}_\infty F^N(z_\infty)$  alakban, ha az  $\tilde{\alpha}_\infty$ -t pontosabban közelítjük felhasználva az

$$\alpha' + \alpha^2 + \mathcal{B}\alpha + \mathcal{A} - \mathcal{M} + 2E^*I_N = 0 \quad (68)$$

definiáló mátrixegyenletet  $\alpha$ -ra. Ugyanúgy, ahogyan a 4.1 fejezetben, több együttható is figyelembe vehető az  $\mathcal{A}$ ,  $\mathcal{B}$  és  $\mathcal{M}$   $z$  szerinti sorfejtéseiben s ezáltal  $\alpha(z)$  sorfejtésében is több tag számítható ki.

Következő lépésként írjuk át a páros és a páratlan problémát elsőrendű egyenletrendszerre a következő módon:

$$G' + \mathcal{P}(z, E^*)G = 0, \quad z_1 \leq z \leq z_\infty, \quad (69)$$

ahol

$$G = \begin{pmatrix} F^N \\ F^{N'} \end{pmatrix}, \quad \mathcal{P}(z, E^*) = \begin{pmatrix} 0_N & -I_N \\ \mathcal{A} - \mathcal{M} + 2E^*I_N & \mathcal{B} \end{pmatrix}, \quad (70)$$

Az  $N$ . rendű nullmátrixot  $0_N$ -val jelöltük. A megoldást keressük a  $[z_1, z_c)$ ,  $(z_c, z_\infty]$  intervallumokon Bahvalov (1977) nyomán

$$G(z) = Y^{(q)}(z)\mathbf{c}^{(q)}(z) \quad (71)$$

alakban, ahol  $Y^{(q)}(z)$   $2N \times N$ -es mátrix míg  $\mathbf{c}^{(q)}(z)$   $N$  elemű vektor és  $q = li, r$ , ahol az  $i = e, o$ . Az  $e$  (= even) index a páros az  $o$  (= odd) pedig a páratlan megoldásokhoz tartozik. Továbbá  $z_1 = z_0$ ,  $0 < z_0 \ll 1$ , ha  $n_3 = 0$ , egyébként  $z_1 = 0$ ,  $z_\infty \gg 1$  és  $q = li$ , vagy  $q = r$ . A normált bal oldali kezdeti feltételek a párosságból, ill. páratlanságból adódnak a korábban mondottaknak megfelelően,

$$Y_1^{lo} = \begin{pmatrix} 0_N \\ I_N \end{pmatrix} \quad Y_1^{le} = \begin{pmatrix} I_N \\ 0_N \end{pmatrix}. \quad (72)$$

Célszerű a jobb oldali határfeltételt is normálni. Így ez

$$Y_\infty^r = \begin{pmatrix} (\alpha_\infty^T \alpha_\infty + I_N)^{-1/2} \\ \alpha_\infty (\alpha_\infty^T \alpha_\infty + I_N)^{-1/2} \end{pmatrix}. \quad (73)$$



Az adjungált rendszerek klasszikus elmélete szerint, ha egy  $G(z, E^*)$  függvényvektor megoldása (69)-nek, akkor  $U^T(z, E^*)G(z, E^*) \equiv 0$ , ha  $U(z, E^*) = V(z, E^*)W(z, E^*)$  és  $V(z, E^*)$  egy megoldása a  $V' - \mathcal{P}^T(z, E^*)V = 0$  egyenletnek.  $W(z, E^*)$  tetszőleges nonszinguláris mátrix. 1961-ben Abramov a  $W$  speciális megválasztásával elérte, hogy az eljárás a legjobb  $U$ -t adja olyan értelemben, hogy  $U$  normája konstans marad a teljes intervallumon. A numerikusan instabilan számolható  $V$ -re nincs szükség, vagy  $U$  ismeretében külön számolható. Ezzel a kérdéssel általánosan foglalkozik Abramov és tsai (1980) cikke. A konkrét esetre alkalmazva l. Balla és Benkő (1996). Bahvalov (1977) megmutatta, hogy ez a faktorizáció az eredeti térben is elvégezhető. Az átmeneti valószínűségek számításakor figyelembe kell majd venni az  $F$  függvényekre vonatkozó normálást és ez az Abramov-faktorizáció alkalmazásakor nem tehető meg. Ezért – az egységes tárgyalás kedvéért – már itt a Bahvalov-faktorizációt használom. (Az eljárás háttéréről bővebben l. még 8.1. függelékét!)

A megoldandó  $Y^{(q)}(z)$ -re vonatkozó kezdetiérték-probléma ezek után:

$$\frac{dY^{(q)}}{dz} + [I_{2N} - Y^{(q)}(Y^{(q)T}Y^{(q)})^{-1}Y^{(q)T}]\mathcal{P}Y^{(q)} = 0 \quad (74)$$

az  $Y^{(i)}(0)$  és  $Y^r(\infty)$  kezdeti feltételek mellett. Amit tehát tennünk kell, az az, hogy egy szinguláris másodrendű csatolt egyenletrendszerre vonatkozó peremérték-probléma helyett egy a fenti intervallumon vele ekvivalens reguláris kezdetiérték-problémát kell megoldanunk. Más szavakkal: a 4.1. fejezetben leírt eljárással analóg kezelést sikerült itt is megvalósítani. A numerikus megoldás a skalár esethez hasonlóan a két végpont felől egy közbülső pontig történik és a sajátértékek kiszámításához itt is csak  $Y^{(q)}(z_c)$  értékekre van szükség. Egy  $E^*$  sajátérték, ha

$$\det(Y^{(i)}(E^*) - Y^r(E^*)) = 0. \quad (75)$$

Amikor  $z = z_c$  rögzített, a fenti reláció egy nemlineáris algebrai egyenlet a keresett sajátértékekre. Azért, hogy  $E_k^{*N}$ -t megkapjuk, meg kell oldani a (74) problémákat numerikusan a megfelelő kezdeti értékkel minden egyes próba  $E^*$ -ra. A számítás stabilitását az (74) faktorizációs eljárás biztosítja, mely mintegy átviszi a határfeltételt a végpontig, vagyis az

$$Y^{(q)T}(z)Y^{(q)}(z) \equiv \text{const} \quad (76)$$

mindig fennáll. A normálás miatt a jobb oldali konstans mátrix (76)-ban minden esetben megegyezik  $I_N$ -el.

Ha  $N = 1$  (adiabatikus közelítés), a feladat egy önadjungált skalár sajátérték-problémára egyszerűsödik, s ekkor könnyen megkapható az a durva alsó becslés, hogy

$$\mu_0(0)/2 < E_0^{*1} \quad (77)$$

és nyilvánvalóan  $E_0^{*1} < E_1^{*1} < E_2^{*1} < \dots$ . Ebben az esetben (66) egyenlet átmegy a Prüfer-transzformáció egyenletébe és a sajátértékek egymás után megkaphatók, ahogyan

azt a 4.1 szakaszban leírtuk. Megjegyzendő, hogy a (67) korlátossági feltétel felső korlátot is ad:  $\lim_{z \rightarrow \infty} \mu(z)/2$  minden  $E_k^{*N}$ -ra. A 4.1 fejezetben leírt eljárás a megfelelő sajátfüggvények nullahelyeit számolta, ugyanígy az  $E_0^{*1} < E_1^{*1} < E_2^{*1} < \dots$  sorozat is megkapható hiánytalanul egy adott alsó és felső korlát között.

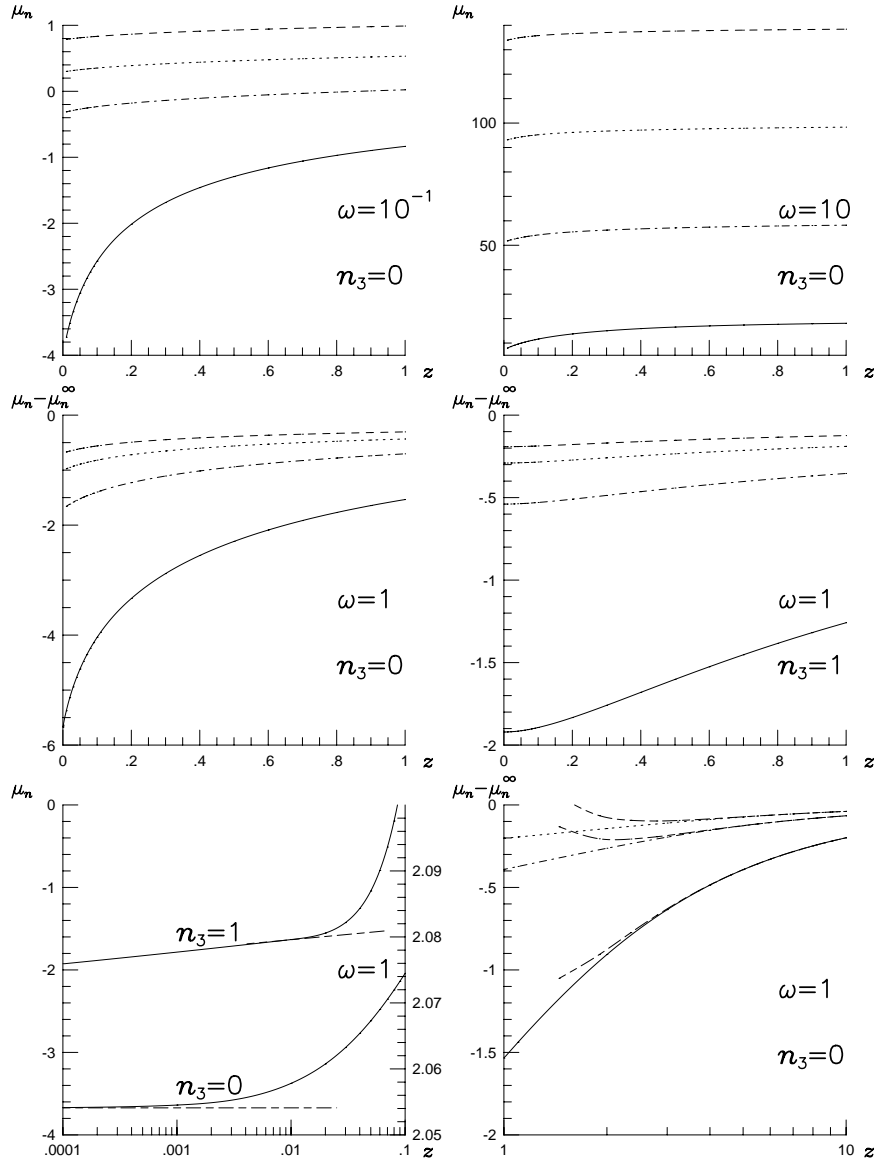
(Itt jegyezzük meg, hogy a fent kifejtett módszer Konyukhova és Pak (1987) munkájában leírt elvi alapokon módosítható lenne  $\omega \rightarrow \infty$  esetre is, ennek azonban csak elvi jelentősége van, hiszen ilyenkor az egzakt aszimptotikus megoldás igen jó közelítés.)

#### 4.4. Numerikus eredmények

Az  $E_k$  sajátértékek kiszámítása a fent leírt algoritmussal a gyakorlatban egy FORTRAN programmal történt. A program főbb technikai részleteit a 8.2. függelék tartalmazza.

A (22) egyenlet numerikus megoldása megadja a  $\mu(z)$  függvényeket tetszőleges rögzített  $\omega$  és  $z$  paraméterértékek és  $n$ ,  $n_3$  kvantumszámok mellett. Néhány ilyen függvényt mutat a 9. ábra. Mindegyik függvény a  $z = 0$ -ban egy véges értékről indul és monoton nő  $\mu_n^\infty = \lim_{z \rightarrow \infty} \mu_n(z)$ -ig. Ez a viselkedés a (45) összefüggés következménye, hiszen ott a jobb oldal, nyilvánvaló módon, nem negatív. Ha  $n_3 = 0$  a  $\mu_n(z)$  függvények  $|z|$ -ben lineárisan indulnak, míg  $n_3 \geq 1$  esetén  $\propto z^2$  módon viselkednek. Túl ezen a kvalitatív képen összehasonlítottuk eredményeinket a létező analitikus, aszimptotikus eredményekkel (l. Barcza 1996) is. A két megközelítési mód mindkét aszimptotikus tartományban várakozásainknak megfelelően egybeesik. Taut (1995) a kétdimenziós Schrödinger-egyenlet polinom alakú megoldásait keresve a (22) egyenlet  $z = 0$  esetén érvényes alakjához analitikusan meghatározta  $\mu_n(0)$ -t bizonyos  $\omega$ ,  $n$  párok esetén. Ezekben a speciális esetekben is a számításaink egybeesnek. A  $\mu$  sajátértékek  $\omega$ -tól való függését különböző  $z$ -kre,  $0 \leq z \ll 1$ ,  $z \gg 1$  Barcza (1996) cikke tartalmazza. A nem aszimptotikus tartományokban végzett számolásaink teljesen hasonló lefutású függvényeket adtak (l. 10. ábra).

A csatolómátrix-elemek kiszámolása igen fontos a (66) egyenlet megoldásához. Az  $A_{nn'}(z)$ ,  $B_{nn'}(z)$  függvényeket mutatja néhány paraméterérték mellett a 11. ábra. Az  $A_{nn'}$  mátrixelemeknek  $n_3 = 0$  esetén  $z = 0$ -nál logaritmikus szingularitásuk van. Egyéb szingularitás sehol, semmilyen más paraméter-kombinációnál sincs.  $B_{nn'}(z)$  további figyelemre méltó tulajdonsága a monotonitás a teljes  $(0, \infty)$  intervallumon, minden egyéb paramétertől függetlenül. Növekvő  $|n - n'|$ -nél mind  $A_{nn'}$  mind  $B_{nn'}$  nemdiagonális elemei egyre gyorsabban csökkennek, ahogy  $z$  nő. Ez együttesen azzal, hogy  $A_{nn'}$  és  $B_{nn'}$  gyorsan lecseng  $z$  már viszonylag kis értékénél, azt mutatja, hogy a (66) egyenletrendszer szinte csak a diagonális elemekkel van csatolva. Ez igen jó előjel a numerikus megoldásra nézve: nagy pontosságú eredményt várhatunk viszonylag kis csatornaszám mellett is. A 12. ábra a csatolómátrixok aszimptotikus viselkedését mutatja az  $n$ ,  $n'$  néhány értékére és  $n_3 = 0, 1$  esetén. Az ábra egyrészt megmutatja az aszimptotikus kezelés érvényességi

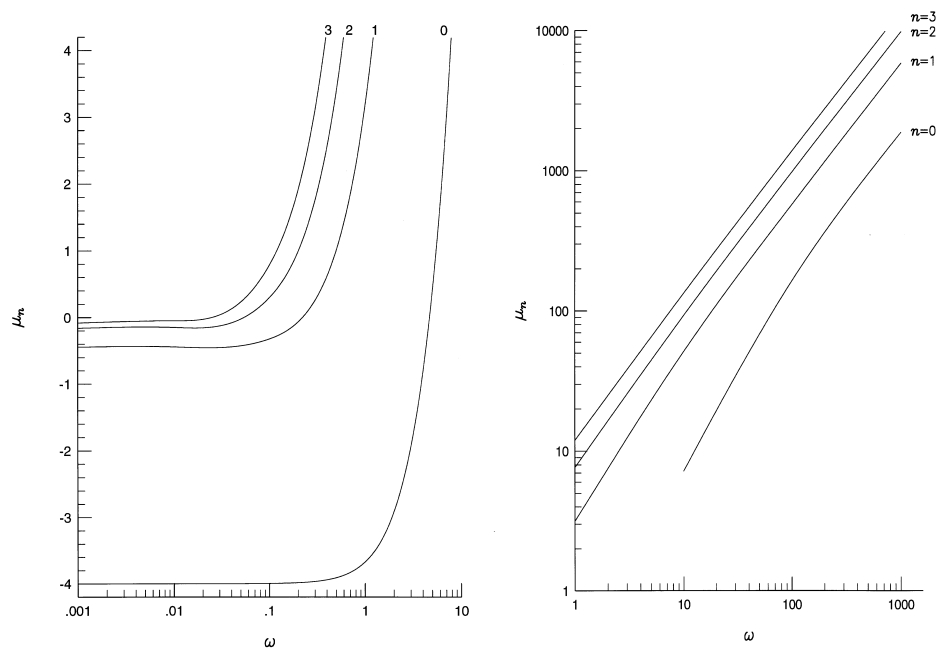


**9. ábra.** A (22) bázisegyenlet  $\mu_n$  sajátértékei  $z$  függvényében  $\omega = 10^{-1}, 1, 10$ ,  $n = 0, 1, 2, 3$ . Folytonos vonal:  $n = 0$ , a pont – vonal  $n = 1$ , pontozott:  $n = 2$ , hosszú vonal – pont:  $n = 3$ . Az alsó ábrákon a szaggatott (rövid – hosszú) vonal az aszimptotikus viselkedést mutatja Barcza (1996) alapján. A jobb oldali függőleges skála  $n_3 = 1$ -hez tartozik.  $\mu_n^\infty = 2\omega(2n + n_3 + 1)$ .

**3. táblázat.** A mágneses térbe helyezett H atom legalsó ( $k = 0$ ) energiaállapotaihoz tartozó  $E_k^N$  sajátértékek (atomi egységekben)<sup>1</sup>,  $\omega$  a Larmor-frekvencia,  $\pi_z = +1$ . A zárójelekben álló számok a felhasznált  $N$  csatornaszámot mutatják. Az R indexszel jelölt értékeket Ruder és tsai (1994) monográfiájából vettük. Az általuk jelzett bizonytalanságot az utolsó jegyben /-jel mutatja.

$-n_3$	$\omega$	$E_{0,R}^N$	$E_0^N$
1	0.7	0.178993 (13)	0.17857 (3)
			0.17869 (5)
	1	0.400387 (15)	0.40059 (2)
			0.40055 (5)
			0.400387(7)
			0.400387(7)
	10	8.5344/5 (12)	8.5329 (1)
			8.53440 (3)
	15	13.2945/6 (12)	13.2930 (1)
			13.2944 (2)
2	100	96.65283/8 (12)	96.65278 (1)
	1	0.528828 (19)	0.52867 (1)
			0.52876 (3)
	10	8.80636/7 (12)	8.80617 (1)
			8.80630 (2)
	100	97.197/8 (12)	97.19785 (1)
3	1	0.596759 (21)	0.59650 (1)
			0.59671 (2)
	10	8.959320/1(12)	8.95963 (1)
			8.95930 (2)
	100	97.51628/9 (12)	97.5164 (1)
4	1	0.640649 (12)	0.64051 (1)
			0.64063 (2)
	10	9.061413 (12)	9.06139 (1)
			9.06144 (2)
	100	97.73363 (12)	97.7338 (1)
5	1	—	0.67202 (1)
			0.67210 (2)
	10	—	9.13612 (1)
			9.13620 (2)
	100	—	97.8958 (1)

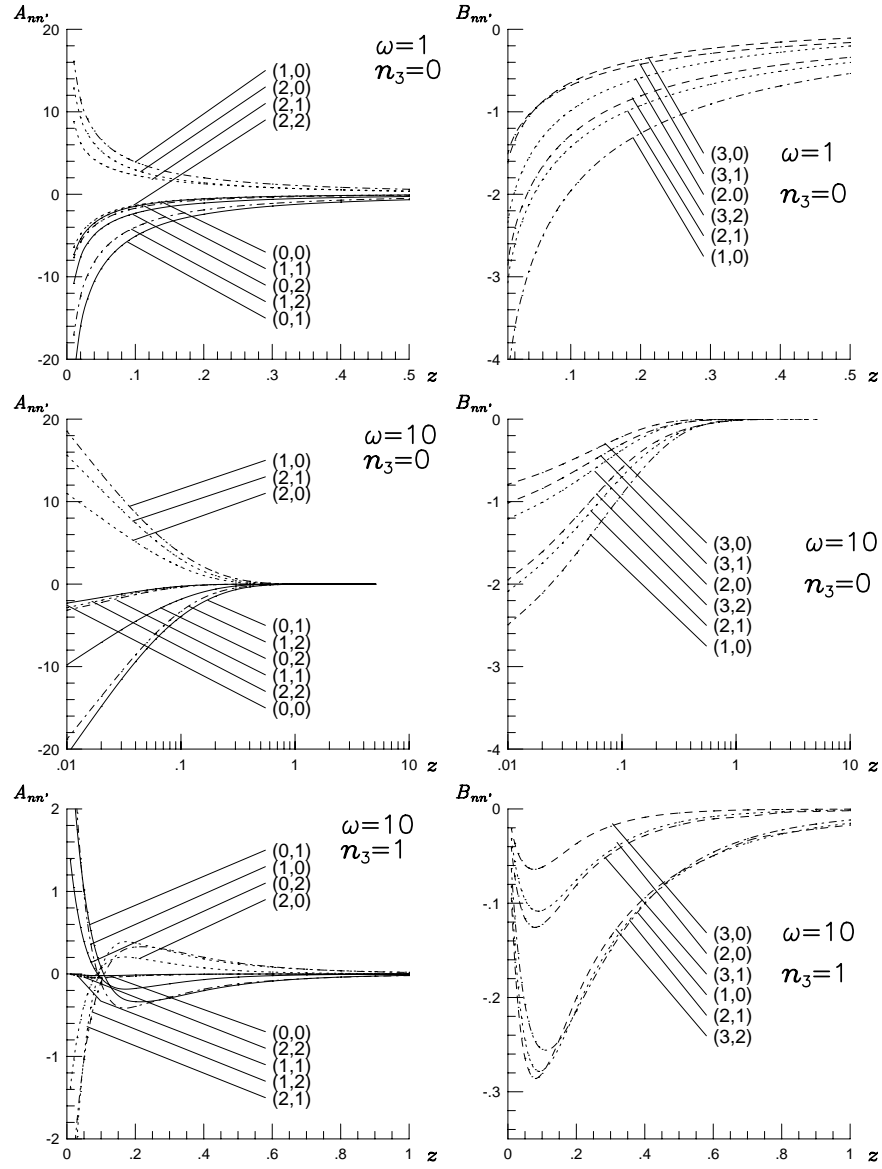
<sup>1</sup>Emlékeztetőül  $\omega = 1$ , ha  $|\mathbf{H}| = 4.7 \times 10^5$  T.



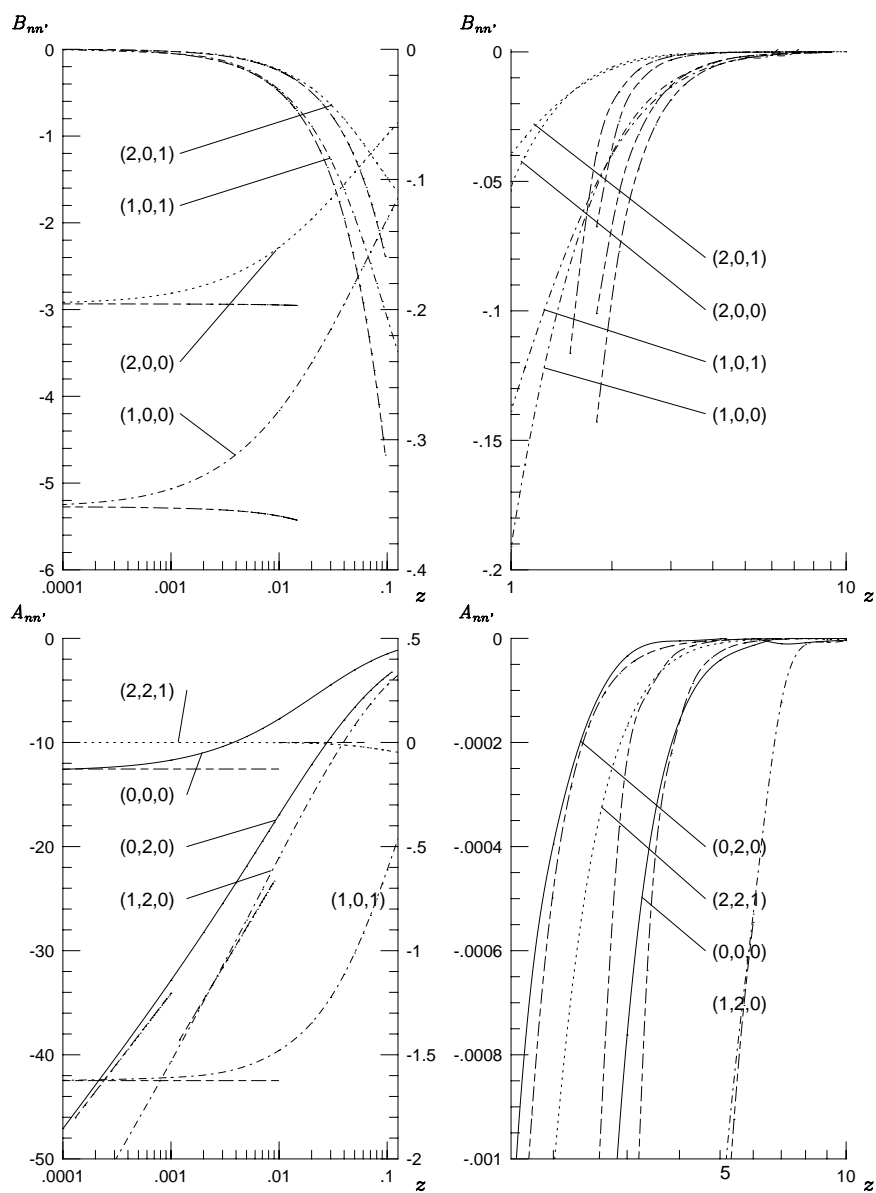
**10. ábra.** Néhány  $\mu_n$  sajátérték mágneses tértől ( $\omega$ ) való függése. A számok  $n$ -t jelentik,  $n_3 = 0$ .

**4. táblázat** Az mágneses térbe tett H atom legalsó ( $k = 0$ ) energianívóhoz tartozó  $E_k^N$  energia-sajátértékei (atomi egységekben) ha  $\pi_z = -1$ . A jelölések ugyanazok, mint a 3. táblázatnál.

$-n_3$	$\omega$	$E_{0,R}^N$	$E_0^N$
1	1	0.75475 (12)	0.754759 (1)
	10	9.623880 (12)	9.62380 (1)
	100	99.538178 (12)	99.5388 (1)
2	1	0.782545 (12)	0.7825457(1)
	10	9.647807 (12)	9.64781 (1)
	100	99.549420 (11)	99.5495 (1)
3	1	0.800862 (12)	0.80186 (1)
	10	9.665419 (12)	9.66542 (1)
	100	99.558673 (9)	99.5589 (1)
4	1	—	0.81445 (1)
	10	—	9.67939 (1)
	100	—	99.5669 (1)



**11. ábra.** Az  $A_{nn'}$ ,  $B_{nn'}$  csatolómátrix-elemek, mint  $z$  függvényei  $n_3 = 0, n_3 = 1$  esetén. A vonaltípusok megegyeznek a 9. ábrán használtakkal. A számpárok jelentése:  $(n, n')$ . A középső ábrák  $z$ -ben logaritmikusak!



**12. ábra.** Az  $A_{nn'}$ ,  $B_{nn'}$  csatológátrix-elemek aszimptotikus viselkedése  $z$  függvényében. Az ábrán látható számhármások  $(n, n', n_3)$ -at jelentik. A vonaltípusok azonosak az 8. ábránál leírtakkal,  $\omega = 1$ . A bal és jobb oldali függőleges tengelyek az  $n_3 = 0$ , illetve  $n_3 = 1$  értékhez tartoznak.

tartományait, másrészt demonstrálja a (58) sorfejtés jogosságát.

Néhány számolási eredmény a 3–4. táblázatban található. Ezek az eredmények jól illusztrálják a bázisválasztás jogosságát, illetve a alkalmazott numerikus eljárás hatékonyságát. Semmilyen nehézség nem adódott a számítások során az  $n_3$  mágneses kvantumszám növelésekor sem. Így könnyen ki tudtunk számítani olyan állapotokat is, amelyeket a hagyományos módszerekkel túlságosan nagy számításigényük miatt eddig senki sem határozott meg. Kiemeljük, hogy a mind ez idáig legteljesebb munka, Ruder és tsai (1994) könyve a 4–8 értékes jegy pontosságot csak viszonylag sok (12 vagy több) csatorna figyelembevételével éri el. A mi módszerünk 4–6 jegyre azonos eredményt ad ezzel mindössze 1–2, maximum 3 csatorna felhasználásával! Ráadásul a részletszámítások során is nagyon kis pontosságok (általában  $10^{-6}$ -os relatív hibakorlátok) elegendőek voltak. Ezzel megmutattuk, hogy Liu és Starace (1987) bázisválasztása nemcsak az általuk eredetileg vizsgált speciális esetben ( $n_3 = 0$ , adiabatikus közelítés), hanem sokkal általánosabban ( $n_3$  különböző értékeire és nemadiabatikus közelítésben) is igen hatékony. Az  $N$  csatornaszám növelésével a pontosság természetesen tovább növelhető.

Érdemes ismét nyomatékosítani a számítás hatékonyságát, amit azzal értünk el, hogy először is nem számoljuk ki a (18) sajátfüggvényeket, ehelyett közvetlenül megkapjuk (20) együtthatóit: a  $\mu(z)$ ,  $A_{nn'}(z)$  és  $B_{nn'}(z)$  függvényeket. Az  $F^N(z)$  vektorfüggvényeket sem határozzuk meg egyetlen lépésében sem az  $E_k^N$  meghatározására szolgáló és az előbbieken leírt iteráció során. Valamint minden  $E_k^N$  sajátértéket definiáló köztes számolás olyan kezdetiérték-problémák megoldásából áll, amelyeknek stabil és sima megoldásuk van. Ez teszi lehetővé számunkra, hogy az eljárás során nagy lépésközzel integráló, egyszerű numerikus algoritmust használjunk.



## 5. Elektromágneses átmeneti valószínűségek

A szintetikus spektrum elkészítéséhez meg kell vizsgálnunk rendszerünk (az erős mágneses térbe tett hidrogénatom) kölcsönhatását környezetével. A valódi abszorpcióért és emisszióért az atomnak a körülötte levő elektromágneses térrel történő kölcsönhatása a felelős. A sugárzási folyamatok leírására egzakt módon a kvantumtérelméleti leírás lenne alkalmas. A követendő eljárás az lenne, hogy az elektronra, protonra és az elektromágneses térre (a  $\mathbf{H}$  mágneses teret nem kell kvantálni) vonatkozó Lagrange-függvények felírása után a teljes (kölcsönható) rendszerre alkalmazzuk a variációs elvet és meghatározzuk a szükséges téregyenletet, majd ennek a megoldását vizsgáljuk. Sajnos ennek az elvi útnak a végigvitelére a mi esetünkben, hasonlóan a gyakorlatban fontos legtöbb atomi rendszerhez, nincs mód. Az ilyenkor szokásos eljárás a perturbációs számítás. Mi a következő közelítésekkel élünk.

[1] Az elektront – mint eddig is – nemrelativisztikusan kezeljük, azaz a Schrödinger-egyenletet tekintjük érvényesnek.

[2] Az elektron sugárzási térrel való kölcsönhatását kis perturbációnak tekintjük és a perturbációs számítást csak az első rendig végezzük el. Más szavakkal: a több foton szimultán elnyelésével, ill. kibocsátásával járó folyamatokat elhanyagoljuk.

[3] A protont továbbra is állónak tételezzük fel és csak mint egy elektrosztatikus tér forrását vesszük figyelembe. (Megjegyzendő, hogy Ruder és tsai (1994) monográfiájukban megmutatják, hogy az [1], [2] keretben dolgozva és a megfelelő közelítések mellett formálisan azonos eredményt kapunk, ha figyelembe vesszük a mag mozgását is.)

### 5.1. Alapegyenletek

A fenti három feltevéssel az előző fejezetekben – az energiaszintek kiszámításakor – használt közelítések elvi szintjén és pontosságán vagyunk. Ezek után a (4) Hamilton-operátor, ha figyelembe vesszük a külső elektromágneses teret és Lorentz-mértéket használunk:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e} \left[ \hat{p} - \frac{1}{2} e \mathbf{H} \times \mathbf{r} - e \hat{A}_f(\mathbf{r}, t) \right]^2 - \frac{Z}{|\mathbf{r}|}. \quad (78)$$

Itt az  $\hat{A}_f$  vektorpotenciál-operátor jellemzi a szabad elektromágneses teret. Kifejezése a kvantumelektrodinamikából ismeretes (l. pl. Schiff 1968).

$$\hat{A}_f(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{s=1}^2 \sqrt{\frac{2\pi c^2 \hbar}{\omega_{\mathbf{k}} V}} \mathbf{e}_{\mathbf{k}s} (e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{a}_{\mathbf{k}s} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{a}_{\mathbf{k}s}^+), \quad (79)$$

ahol  $\mathbf{k}$  a fotonok hullámszámvektora,  $\mathbf{e}_s$   $s = 1, 2$  a polarizációs egységvektorok,  $\text{div} \mathbf{A}_f = 0$  miatt  $\mathbf{e}_s \perp \mathbf{k}$ .  $\hat{a}_{\mathbf{k}s}$ ,  $\hat{a}_{\mathbf{k}s}^+$  a fotonnyelől és -keltő operátorokat jelenti. A  $V$  a normálási térfogat,  $\omega_{\mathbf{k}}$  a  $\mathbf{k} = |\mathbf{k}|$  hullámszámú foton körfrekvenciája.

Tegyük fel, hogy a  $t = 0$  időpillanatban – a kölcsönhatás bekapcsolása előtt – a rendszer sajátállapotban van. Az atom sajátenergiája legyen  $E_a$ , sajátfüggvénye  $\Psi_a$ , a sugárzási tér energiája  $E_n^f$ , sajátfüggvénye  $\Psi_n^f = \Psi^f(n_{k_1})\Psi^f(n_{k_2})\dots\Psi^f(n_k)\dots$ . A kezdeti állapot jellemzésére szolgáló  $a$  index az atom összes kvantumszámát jelöli, míg az  $n$  index az  $n_{k_1}, n_{k_2}, \dots, n_k, \dots$  fotonszámok sorozatát jelenti. A kezdeti sajátállapotot tehát  $\tilde{\Psi}_{an} = \Psi_a \Psi_n^f$  alakban tesszük fel. Hasonló módon a kölcsönhatás kikapcsolása után a rendszer legyen egy  $b, n'$  indexekkel jellemzett  $\tilde{\Psi}_{bn'} = \Psi_b \Psi_{n'}^f$  sajátállapotban. Annak a valószínűsége, hogy az összes lehetséges végállapot közül éppen a  $\tilde{\Psi}_{bn'}$  valósul meg, a (78) operátor kölcsönhatási részének mátrixelemei segítségével adható meg, hiszen ennek a  $H_{bn',an}$  mátrixnak a négyzete éppen a keresett átmeneti valószínűség. A  $H_{bn',an}$  mátrix:

$$H_{bn',an} = -\frac{e}{m_e} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{s=1}^2 \sqrt{\frac{2\pi c^2 \hbar}{\omega_{\mathbf{k}} V}} \left( \tilde{\Psi}_{bn'} \mathbf{e}_{\mathbf{k}s} \left( \hat{p} - \frac{1}{2} e \mathbf{H} \times \mathbf{r} \right) [e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{a}_{\mathbf{k}s} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{a}_{\mathbf{k}s}^\dagger] \tilde{\Psi}_{an} \right), \quad (80)$$

alakú miután a (79) kifejezést (78)-be helyettesítve a Hamilton-operátor kölcsönhatást leíró részét vesszük. A fotonkeltő és -nyelő operátorok sajátérték-egyenletei:

$$\Psi^f(n_{ks} - 1) = \frac{1}{\sqrt{n_{ks}}} \hat{a}_{\mathbf{k}s} \Psi^f(n_{ks}) \quad (81)$$

és

$$\Psi^f(n_{ks} + 1) = \frac{1}{\sqrt{n_{ks} + 1}} \hat{a}_{\mathbf{k}s}^\dagger \Psi^f(n_{ks}). \quad (82)$$

Beírva ezeket az egyenleteket a (80) kifejezésbe kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} & \left( \tilde{\Psi}_{bn'} \mathbf{e}_{\mathbf{k}s} \left( \hat{p} - \frac{1}{2} e \mathbf{H} \times \mathbf{r} \right) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{a}_{\mathbf{k}s} \tilde{\Psi}_{an} \right) = \\ & \sqrt{n_{ks}} \int \Psi_b^* \mathbf{e}_{\mathbf{k}s} \left( \hat{p} - \frac{1}{2} e \mathbf{H} \times \mathbf{r} \right) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \Psi_a dV \delta_{n_{k_1} n'_{k_1}} \dots \delta_{n'_k n_k - 1} \dots, \end{aligned} \quad (83)$$

illetve

$$\begin{aligned} & \left( \tilde{\Psi}_{bn'} \mathbf{e}_{\mathbf{k}s} \left( \hat{p} - \frac{1}{2} e \mathbf{H} \times \mathbf{r} \right) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{a}_{\mathbf{k}s}^\dagger \tilde{\Psi}_{an} \right) = \\ & \sqrt{n_{ks} + 1} \int \Psi_b^* \mathbf{e}_{\mathbf{k}s} \left( \hat{p} - \frac{1}{2} e \mathbf{H} \times \mathbf{r} \right) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \Psi_a dV \delta_{n_{k_1} n'_{k_1}} \dots \delta_{n'_k n_k + 1} \dots, \end{aligned} \quad (84)$$

vagyis csak azok a mátrixelemek nem nullák, ahol egy  $\omega_k$  körfrekvenciájú foton keletkezik, ill. eltűnik, miközben az atom az  $a$ -ból a  $b$  állapotba jut.

Mivel a három folyamat (abszorpció, indukált és spontán emisszió) nem függetlenek egymástól, a továbbiakban elegendő a (84) fotonszámtól nem függő részével, azaz a spontán emisszió valószínűségével foglalkozni. Ez (80) és (84) alapján nem más mint

$$|H_{ba}^{\mathbf{k}s}|^2 = \left| \int \Psi_b^*(\mathbf{r}) \mathbf{e}_{\mathbf{k}s} [e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \left( \hat{p} - \frac{1}{2} e \mathbf{H} \times \mathbf{r} \right)] \Psi_a(\mathbf{r}) dV \right|^2. \quad (85)$$

Szemléletesen ez az a mennyiség, amely a  $\nu$  frekvenciájú ( $h\nu = E_a - E_b$ ) színeképvonal erősségét jellemzi.

Tegyük még egy további közelítést! Fejtsük sorba a  $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ -t. Mivel az elektron  $|\mathbf{r}|$  távolsága a magtól  $\sim 10^{-10}$  m,  $|\mathbf{k}| = 2\pi/\lambda$  az optikai tartományban ( $\lambda \sim 10^{-7}$  m)  $10^{-3}$  nagyságrendű, megállhatunk a sor első tagjánál az 1-nél. Ezt a közelítést hívják dipól közelítésnek. A spektrum röntgen- és gammatartományában ez a közelítés már nem jogos. (Rydberg-atomok esetén sem megfelelő, de szerencsére ilyenek a csillagok légkörében nincsenek.) A konstans szorzótól eltekintve a kiszámítandó mennyiség a

$$|\mathbf{p}_{ba}^s|^2 = \left| \int \Psi_b^*(\mathbf{r}) \mathbf{e}_s \left( \hat{p} - \frac{1}{2} e \mathbf{H} \times \mathbf{r} \right) \Psi_a(\mathbf{r}) dV \right|^2 \quad (86)$$

dipóluserősség. Megjegyzendő, hogy a (86) közelítés már nem függ  $\mathbf{k}$ -tól. Noha (86) közvetlenül is alkalmas számolásra és mint ilyen, a dipóluserősség egy alternatív felírásának tekinthető, az  $\omega = 0$  mágneses tér nélküli esetben szokásos helyettesítés (l. Bethe és Salpeter 1957) itt is végigvihető. Ekkor

$$\mathbf{p}_{ba}^s = \int \Psi_b^*(\mathbf{r}) \mathbf{e}_s \mathbf{r} \Psi_a(\mathbf{r}) dV. \quad (87)$$

Legyen az elektron  $\mathbf{r}$  helyvektora és az  $\mathbf{e}_s$  polarizációs vektor szöge  $\tilde{\vartheta}$ , ekkor

$$|\mathbf{p}_{ba}^s|^2 = \left| \int \Psi_b^*(\mathbf{r}) \mathbf{r} \Psi_a(\mathbf{r}) dV \right|^2 \cos^2 \tilde{\vartheta}. \quad (88)$$

Amennyiben a sugárzás szögeloszlásától eltekintünk, a meghatározandó mennyiségek most már csak a megfelelő dipóluserősségek, illetve az azokhoz szükséges dipólmátrix-elemek

$$\mathbf{p}_{ba} = \int \Psi^*(E_b) \mathbf{r} \Psi(E_a) dV. \quad (89)$$

## 5.2. A dipóluserősség közvetlen kiszámítása

A szokásos módon (89) kiszámításában az első lépés a időtől független Schrödinger-egyenlet numerikus megoldása kétszer (mindkét  $E$ -re), amelynek során általában szimultán megkapjuk az  $E$  mellett a  $\Psi$  hullámfüggvényeket is. Ezután  $\mathbf{p}_{ba}$  nemeltűnő elemeit numerikus integrálással határozzuk meg. Sajnos a legtöbb numerikus módszer a magtól távol pontatlan sajátfüggvényt ad. Az  $\mathbf{r}$  súlyfüggvény a (89) kifejezésben pedig még fel is erősíti ezt a pontatlanságot. További hibaforrás maga a numerikus integráló algoritmus. Mindezek arra vezetnek, hogy a  $\mathbf{p}$  érték pontosságára nehezen lehet becslést adni.

Esetünkre – a diamágneses Coulomb-problémára – kidolgoztunk egy alternatív kiszámítási módot  $\mathbf{p}_{ba}$  nemeltűnő elemeire (Benkő és Balla 1998, Balla és Benkő 1999). A módszer az általunk leírt formában a nemsziparabilis problémák egy osztályára (l. Barcza 1994) közvetlenül alkalmazható. Az elve pedig ennél bizonyára szélesebb körben is működik.

A korábbiakhoz hasonlóan használjunk itt is hengerkoordináta-rendszert. Ekkor a  $\mathbf{p}_{nm} = (p_x, p_y, p_z)$  vektor komponensei (itt az  $n, m$  indexeket elhagytuk) felírhatók, mint

$$\begin{aligned} p_\varrho &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} \Psi^*(E_n) \Psi(E_m) \varrho^2 \cos \varphi d\varphi d\varrho dz, \\ p_\varphi &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} \Psi^*(E_n) \Psi(E_m) \varrho^2 \sin \varphi d\varphi d\varrho dz, \\ p_z &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} \Psi^*(E_n) \Psi(E_m) \varrho z d\varphi d\varrho dz. \end{aligned} \quad (90)$$

A  $\Psi$  függvényt (8)-nak megfelelően szeparáltnak tételezzük fel, azaz a korábbi jelölésekkel

$$\Psi(E_n; \varrho, z, \varphi) = (2\pi)^{-1/2} \exp(in_3^{(n)} \varphi) \psi(E_n; z, \varrho). \quad (91)$$

Helyettesítsük (91)-et (90)-ba! Vegyük észre, hogy a  $\mathbf{p}$  vektor függése a

$$\Delta n_3 := n_3(\Psi(E_m)) - n_3(\Psi(E_n)) = n_3^{(m)} - n_3^{(n)} \quad (92)$$

értékétől kvalitatív módon különbözik. Nevezetesen, ha  $\Delta n_3 = 0$  akkor  $p_\varrho = p_\varphi = 0$  és

$$p_z = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \psi(E_n) \psi(E_m) \varrho z d\varrho dz. \quad (93)$$

(Itt a  $\psi$  függvény  $\varrho, z$  argumentumát elhagytuk.) Míg, ha  $\Delta n_3 = \pm 1$  akkor  $p_z = 0$  és

$$\begin{aligned} p_\varrho &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \psi(E_n) \psi(E_m) \varrho^2 d\varrho dz \\ p_\varphi &= \pm \frac{i}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \psi(E_n) \psi(E_m) \varrho^2 d\varrho dz. \end{aligned} \quad (94)$$

Megjegyzendő, hogy a második kifejezés nem szükséges  $|\mathbf{p}_{nm}|^2$  kiszámításakor. Ha pedig  $|\Delta n_3| > 1$ , akkor  $p_z = p_x = p_y = 0$ . (Ezzel tulajdonképpen levezettük a hidrogénatomra vonatkozó jól ismert kiválasztási szabályokat.) A nemeltűnő komponensek mindegyike felírható az alábbi integrál formájában

$$I_s^{(nm)} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \psi(E_n) \psi(E_m) s(\varrho, z) d\varrho dz \quad (95)$$

$$\text{ahol } s(\varrho, z) = \begin{cases} \varrho z & \text{ha } \Delta n_3 = 0 \\ \varrho^2 & \text{ha } \Delta n_3 = \pm 1. \end{cases} \quad (96)$$

Vegyük figyelembe a paritást is! Mivel  $\psi(E)$   $z$ -ben páros, vagy páratlan (és ennek megfelelően változik  $s$  is) a következőkre jutunk

$$I_s^{(nm)} = \begin{cases} 2 \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \psi(E_n) \psi(E_m) \varrho z d\varrho dz, & \text{ha } \Delta n_3 = 0 \text{ és } \pi_z^{(n)} \neq \pi_z^{(m)}, \\ 2 \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \psi(E_n) \psi(E_m) \varrho^2 d\varrho dz, & \text{ha } \Delta n_3 = \pm 1 \text{ és } \pi_z^{(n)} = \pi_z^{(m)}, \\ 0 & \text{egyébként,} \end{cases} \quad (97)$$

ahol  $\pi_z^{(n)}$ ,  $\pi_z^{(m)}$  a megfelelő  $\psi_n$ ,  $\psi_m$  függvények  $z$ -beli paritását jelöli. A (12) normálási feltétel is (95) alakra hozható:  $n = m$ ,  $s(\varrho, z) = \varrho$ , és így

$$\int_0^\infty \int_0^\infty \psi^2(E_n) \varrho d\varrho dz = \frac{1}{2}. \quad (98)$$

Az áttekinthetőség kedvéért a megfelelő függvények  $E_m$ -hez, illetve  $E_n$ -hez való tartozását egy felső indexszel fogjuk jelölni, ahol ez szükséges, hasonló módon jelöljük a paritást is.

A korábban a 4. fejezetben, illetve Balla és Benkő (1996) cikkében leírt sémát használjuk, vagyis a  $\psi(E_m)$ -et úgy definiáljuk, hogy

$$\psi(E_n) = \sum_{k=0}^{\infty} f_k^{(n)}(z) \hat{\Phi}_k^{(n)}(z, \varrho), \quad (99)$$

ahol  $\hat{\Phi}_0^{(n)}(z, \varrho)$ ,  $\hat{\Phi}_1^{(n)}(z, \varrho), \dots$  a Liu–Starace bázis elemei, amelyek a megfelelő  $\mu_0^{(n)}(z)$ ,  $\mu_1^{(n)}(z), \dots$  sajátértékekhez tartoznak (l. 4. fejezet, Barcza 1996, Liu és Starace 1987) és tetszőleges  $z$  esetén  $\varrho$  szerint ortonormáltak a (19)-nak megfelelően, míg  $E_n^*$ ,  $f_0^{(n)}(z)$ ,  $f_1^{(n)}(z), \dots$  a (20) sajátérték-probléma megoldásai, ahol a csatolómátrixokat (21) definiálja.

A normálás (98) kifejezésébe beírva a (99) feltevést és alkalmazva a (19) ortonormálást kapjuk, hogy

$$\int_0^\infty \sum_{k=0}^{\infty} [f_k^{(n)}(z)]^2 dz = \frac{1}{2}. \quad (100)$$

A korábbiakban megmutattuk, hogy a  $\{\mu_k^{(n)}(z)\}_{k=0}^\infty$ ,  $\{A_{kk'}^{(n)}(z)\}_{k,k'=0}^\infty$  és  $\{B_{kk'}^{(n)}(z)\}_{k,k'=0}^\infty$  kiszámításához nincs szükség maguknak a  $\{\hat{\Phi}_k^{(n)}(z)\}_{k=0}^\infty$  Liu–Starace báziselemeknek az ismeretére. A (20) helyett egy véges differenciálegyenlet-rendszerre vonatkozó sajátérték-problémával foglalkoztunk, amely (66) alakú volt. Az előző részben azt is megmutattuk, hogyan lehet az  $E_n^{*N}$  közelítő sajátértékeket megkapni  $F_n^N(z)$  kiszámítása nélkül. Az egységes tárgyalás kedvéért tegyük meg a következő szétválasztást:

$$s(\varrho, z) = \varrho s_1(\varrho) s_2(z) \quad (101)$$

$$s_1(\varrho) = s_1^{(1)}(\varrho) \equiv 1, \quad \text{vagy} \quad s_1(\varrho) = s_1^{(2)}(\varrho) = \varrho, \quad (102)$$

$$s_2(z) = s_2^{(1)}(z) \equiv 1, \quad \text{vagy} \quad s_2(z) = s_2^{(2)}(z) = z. \quad (103)$$

Továbbá legyen

$$K_{pq}^{(nmi)}(z) = \int_0^\infty \hat{\Phi}_p^{(n)}(\varrho, z) \hat{\Phi}_q^{(m)}(\varrho, z) \varrho s_1^{(i)}(\varrho) d\varrho, \quad i = 1, 2. \quad (104)$$

Ezután, ha a (95) kifejezésbe beírjuk a (99) feltevést és figyelembe vesszük (98) normálást, valamint  $K_{pq}^{(nmi)}(z)$  fenti definícióját is, kapjuk hogy

$$I_s^{(nm)} = 2 \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \mathcal{F}_{kl}^{(nmi)}, \quad (105)$$

ahol

$$\mathcal{F}_{kl}^{(nmi j)} = \int_0^\infty f_k^{(n)}(z) f_l^{(m)}(z) s_2^{(j)}(z) K_{kl}^{(nmi)}(z) dz, \quad j = 1, 2. \quad (106)$$

Ezekkel a jelölésekkel (98) is átírható, mint

$$2 \sum_{k=0}^{\infty} \mathcal{F}_{kk}^{(nn11)} = 1. \quad (107)$$

A (104) integrál formálisan igen hasonló azokhoz, amelyeket a 4. fejezetben már kiszámítottunk, de a korábban szereplő  $\mathcal{A}(z), \mathcal{B}(z)$  mennyiségek csak egyetlen  $n_3^{(n)}$ -től függtek és ennek megfelelően csak egy  $\{\hat{\Phi}_k^{(n)}(\varrho, z)\}_{k=0}^\infty$  bázisrendszert kellett figyelembe venni kiszámításuk során. Az alábbiakban megadjuk az olyan funkcionálok kiszámítását, amelyekben az egyes függvények különböző bázisrendszerekhez tartoznak.

A Liu–Starace bázis normáltsága miatt igaz az, hogy  $K_{pq}^{(nm1)}(z) \equiv \delta_{pq}$ , ha  $\Delta n_3 = 0$ . A 4. fejezetben leírt eljárással teljesen analóg módon megkaphatjuk  $K_{pq}^{(nmi)}(z)$  egyéb indexekre vonatkozó értékeit is. Az  $I_{pq}^{(i)}$  funkcionálra vonatkozó (57) relációhoz hasonlóan felírhatjuk, hogy

$$K_{pq}^{(nmi)}(z) = r_p^{(n)}(\varrho_c, z) r_q^{(m)}(\varrho_c, z) [k_{pq}^{(nmi)l}(\varrho_c, z) - k_{pq}^{(nmi)r}(\varrho_c, z)] \quad (108)$$

ahol, teljesen hasonlóan (40)-höz

$$r_s^{(t)}(\varrho_c, z) = [h_s^{(t)l}(\varrho_c, z) - h_s^{(t)r}(\varrho_c, z)]^{-1/2}$$

és  $(t, s) = (m, q)$ , vagy  $(n, p)$ , míg

$$\begin{aligned} \frac{dk_{pq}^{(nmiw)}(\varrho, z)}{d\varrho} &= [v_p^{(n)}(\varrho, z) + v_q^{(m)}(\varrho, z)] k_{pq}^{(nmiw)}(\varrho, z) \\ &\quad + \frac{\sin \theta_p^{(n)}(\varrho, z) \cos \theta_q^{(m)}(\varrho, z)}{\nu_p(\varrho) \nu_q(\varrho)} s_1^{(i)}(\varrho) \end{aligned} \quad (109)$$

$$k_{pq}^{(nmi)l}(\varrho_0, z) = \frac{\nu_{p0}^{(n)} \nu_{q0}^{(m)}}{(\frac{1}{2} + |n_3^{(n)}|)(\frac{1}{2} + |n_3^{(m)}|)(1 + i + |n_3^{(n)}| + |n_3^{(m)}|)} \varrho_0^{2+i} + O(\varrho_0^{3+i}) \quad (110)$$

$$k_{pq}^{(nmi)r}(\varrho_\infty, z) = -\frac{\nu_{p\infty}^{(n)} \nu_{q\infty}^{(m)}}{2\omega^3} \varrho_\infty^{-4+i} + O(\varrho_\infty^{-5+i}). \quad (111)$$

A  $K_{pq}^{(nmiw)}$ -re vonatkozó egyenletek (54) általánosításai. Ott azonos  $n_3$ -hoz tartozó bázisfüggvények szerepeltek. Itt a különböző  $n_3^{(n)}$ ,  $n_3^{(m)}$ -ekhez tartozó bázisok a  $v_p^{(n)}$ ,  $v_q^{(m)}$  kifejezésekben jelennek meg. Természetesen (54)-hez képest itt a súlyfüggvények is mások, amelyek a kezdeti értékeket is nagyban befolyásolják. Minden egyéb szükséges adat a 4.2 fejezetben leírtakkal azonos módon adódik.

Egy adott pontosságú eredményhez nem szükségeszerű mindkét állapot azonos csatornaszámú közelítése. Jelöljük az  $n$ . állapothoz tartozó csatornaszámot  $N$ -nel, az

$m$ -hez tartozót pedig  $M$ -mel. Miután  $N$ -et és  $M$ -et rögzítettük, megadhatjuk a (100), (105) és (106) formulák megfelelő közelítéseit

$$1 = 2 \int_0^\infty F^{NT}(z) F^N(z) dz = 2 \int_0^\infty F^{NT}(z) \mathcal{K}^{(nn11)}(z) F^N(z) dz, \quad (112)$$

$$I_s^{nm} = 2 \int_0^\infty F^{NT}(z) \mathcal{K}^{(nmij)}(z) F^M(z) dz, \quad (113)$$

ahol bevezettük a  $\mathcal{K}^{(nmij)}(z)$  mátrixot a  $(\mathcal{K}^{(nmij)}(z))_{kl} = s_2^{(j)}(z) K_{kl}^{(nmi)}(z)$ ,  $k = 0, \dots, N-1$ ,  $l = 0, \dots, M-1$  elemekkel. Ekkor a (113) szintén egy kvadratikus funkcionál, amely hasonlónak látszik (104)-hez. Van azonban egy lényeges különbség! Korábban jeleztük, hogy az önadjungált problémák sajátfüggvényeiből álló kvadratikus funkcionálok kiszámítása mind a skalár, mind a mátrix esetre  $(\mathcal{K}_{pq}^{(nmi)}(z))$  matematikailag kidolgozott (Kitoroage és tsai 1987, 1989). Ezek a módszerek Abramov és tsai (1980), Birger (1968) által ismerttetett ortogonális faktorizációs eljárásokon alapulnak. A (106)-ben szereplő  $\{f_k^{(n)}(z)\}_{k=0}^\infty$  és  $\{f_k^m(z)\}_{k=0}^\infty$  függvények a (20) nem-önadjungált probléma megoldásai. Hasonló igaz a (66) csonkított rendszerből származókra is. A differenciális ortogonális faktorizáció egy másik változatát azonban, amelyet Bahvalov (1977) dolgozott ki, sikerült alkalmassá tennünk a nem-önadjungált problémák sajátfüggvényeiből alkotott kvadratikus funkcionálok hasonló kiszámítására. A faktorizáció maga már szerepelt a korábbiakban. Az (69)–(74) alapösszefüggéseket fogjuk itt is használni. A  $\mathbf{c}$  vektorra vonatkozó egyenletre (v.ö. 8.1. függelék) korábban nem volt szükség a következőkben viszont kihasználjuk, így most felírjuk, hogy

$$\frac{d\mathbf{c}}{dz} + (Y^T Y)^{-1} Y^T \mathcal{P} Y \mathbf{c} = 0. \quad (114)$$

Meg kell azonban jegyezni, hogy a (114) egyenlet megoldására továbbra sem lesz szükség, mindössze a formulák levezetése végett van rá szükség. A további formulákban, ha ez nem okoz zavart, az  $m$  és  $n$  indexeket elhagyjuk.

A funkcionál kiszámítására alkalmassá tett új módszerünk a normálást a következőképpen veszi figyelembe. Írjuk át (112)-at

$$\int_0^\infty G^{NT}(z) \tilde{\mathcal{K}}^{(nn11)}(z) G^N(z) dz = \frac{1}{2}, \quad (115)$$

ahol

$$\tilde{\mathcal{K}}^{(nn11)} = \begin{pmatrix} \mathcal{K}^{(nn11)} & 0_N \\ 0_N & 0_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_N & 0_N \\ 0_N & 0_N \end{pmatrix}. \quad (116)$$

Ha a (115) kifejezés bal oldalát az  $\int_{z_1}^{z_\infty} = \int_{z_1}^z + \int_z^{z_\infty}$ , összeg formájában keressük, és a  $H^{N1\pi_z}(z)$ ,  $H^{Nr}(z)$  mátrixok, valamint a  $\mathbf{c}^{N1\pi_z}$ ,  $\mathbf{c}^{Nr}$  vektorok a

$$\begin{aligned} \int_{z_1}^z G^{NT}(\zeta) \tilde{\mathcal{K}}^{(nn11)}(\zeta) G^N(\zeta) d\zeta &= \mathbf{c}^{N1\pi_z T}(z) H^{N1\pi_z}(z) \mathbf{c}^{N1\pi_z}(z) \\ \int_z^{z_\infty} G^{NT}(\zeta) \tilde{\mathcal{K}}^{(nn11)}(\zeta) G^N(\zeta) d\zeta &= -\mathbf{c}^{Nr T}(z) H^{Nr}(z) \mathbf{c}^{Nr}(z) \end{aligned} \quad (117)$$

módon vannak definiálva, akkor ( $N$ -et elhagyva)  $z$  szerint deriválva mindkét oldalt és figyelembe véve (71), (74) és (114) összefüggéseket kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} \frac{dH^{(w)}}{dz} - H^{(w)}(Y^{(w)T}Y^{(w)})^{-1}Y^{(w)T}\mathcal{P}Y^{(w)} - Y^{(w)T}\mathcal{P}^TY^{(w)}(Y^{(w)T}Y^{(w)})^{-1}H^{(w)} \\ - Y^{(w)T}\tilde{\mathcal{K}}^{(nn11)}Y^{(w)} = 0 \end{aligned} \quad (118)$$

$$H^{l\pi_z}(z_1) = 0_N \quad H^r(z_\infty) = 0_N \quad w = l\pi_z, r.$$

Ekkor (117) felhasználásával (115) felírható, mint

$$\mathbf{c}^{lT}(z_c)H^l(z_c)\mathbf{c}^l(z_c) - \mathbf{c}^{rT}(z_c)H^r(z_c)\mathbf{c}^r(z_c) = \frac{1}{2}, \quad (119)$$

amely tetszőleges rögzített  $z_1 \leq z_c < z_\infty$  pontban fennáll.  $\mathbf{c}^{l\pi_z}(z_c)$  és  $\mathbf{c}^r(z_c)$  meghatározásához (119)-et és a

$$Y^{l\pi_z}(z_c)\mathbf{c}^{l\pi_z}(z_c) - Y^r(z_c)\mathbf{c}^r(z_c) = 0 \quad (120)$$

relációt használhatjuk, amely a (74) egyenlet következménye. Igaz továbbá, hogy  $Y^TY \equiv I_N$  (minden – itt nem jelzett – indexre). Ekkor  $\mathbf{c}^{l\pi_z}(z_c) = a\mathbf{v}_1$ ,  $\mathbf{c}^r(z_c) = a\mathbf{v}_2$ , ahol  $\mathbf{v}_1$  egy tetszőleges megoldása az

$$[Y^{l\pi_z T}(z_c)Y^r(z_c)Y^{rT}(z_c)Y^{l\pi_z}(z_c) - I_N]\mathbf{v}_1 = 0, \quad (121)$$

algebrai sajátérték-egyenletnek, valamint

$$\mathbf{v}_2 = Y^{rT}(z_c)Y^{l(i)}(z_c)\mathbf{v}_1, \quad a = [\mathbf{v}_1^T H^{l\pi_z}(z_c)\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2^T H^r(z_c)\mathbf{v}_2]^{-\frac{1}{2}}. \quad (122)$$

Végül legyen  $I_s^{(nm)} = \int_{z_1}^z + \int_z^{z_\infty}$ , s ekkor definiáljuk a  $Q^{(nmw)}$  mátrixot a korábbiakkal analóg módon úgy, hogy

$$\begin{aligned} \int_{z_1}^z G^{NT}(\zeta)\tilde{\mathcal{K}}^{(nmij)}(\zeta)G^M(\zeta)d\zeta &= \mathbf{c}^{Ml\pi_z T}(z)Q^{(nml\pi_z)}(z)\mathbf{c}^{Nl\pi_z}(z), \\ \int_z^{z_\infty} G^{NT}(\zeta)\tilde{\mathcal{K}}^{(nmij)}(\zeta)G^M(\zeta)d\zeta &= -\mathbf{c}^{MrT}(z)Q^{(nmr)}(z)\mathbf{c}^{Nr}(z), \end{aligned} \quad (123)$$

teljesüljön, ahol

$$\tilde{\mathcal{K}}^{(nmij)} = \begin{pmatrix} \mathcal{K}^{(nmij)} & 0_{N \times M} \\ 0_{N \times M} & 0_{N \times M} \end{pmatrix}. \quad (124)$$

Így  $Q^{(nmw)}$ -re kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} \frac{dQ^{(nmw)}}{dz} - Q^{(nmw)}(Y^{(mw)T}Y^{(mw)})^{-1}Y^{(mw)T}\mathcal{P}^{(m)}Y^{(mw)} \\ - Y^{(nw)T}\mathcal{P}^{(nw)T}Y^{(nw)}(Y^{(nw)T}Y^{(nw)})^{-1}Q^{(nmw)} - Y^{(mw)T}\tilde{\mathcal{K}}^{(nmij)}Y^{(nw)} = 0 \end{aligned} \quad (125)$$

$$Q^{(nml\pi_z)}(z_1) = 0_{N \times M} \quad Q^{(nmr)}(z_\infty) = 0_{N \times M}.$$

Ezek után már a funkcionál egyszerűen megadható, mint

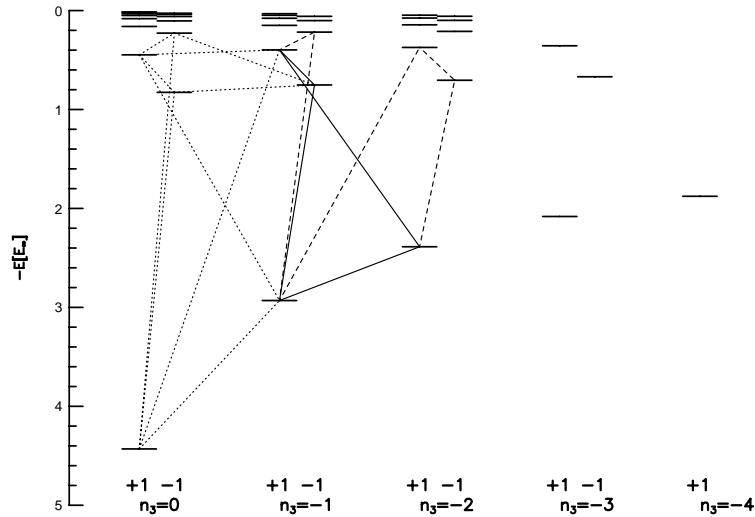
$$I_s^{(nm)} = \mathbf{c}^{(ml)T}(z_c)Q^{(nml)}(z_c)\mathbf{c}^{(nl)}(z_c) - \mathbf{c}^{(mr)T}(z_c)Q^{(nmr)}(z_c)\mathbf{c}^{(nr)}(z_c). \quad (126)$$



### 5.3. A módszer numerikus tesztje

Módszerünk érvényességét ellenőrizendő különböző fizikai paraméterekkel jellemzett átmeneteket választottunk. Az 5. táblázat mutatja az általunk kiszámított dipóluserősségeket összevetve a Ruder és tsai (1994) által korábban közöltekkel. A kezdeti és végállapotokat azok aszimptotikus kvantumszámaival jellemeztük, vagyis:  $n_p$ ,  $l$ ,  $n_3$  a fő-, mellék- és mágneses kvantumszámokkal, amelyek  $\omega = 0$  esetén tartoznak az állapothoz, illetve az  $n$ ,  $n_3$ ,  $\nu$  kvantumszámokkal, amelyek az  $\omega \rightarrow \infty$  esetén igazak. Erre azért van szükség, mivel, mint azt korábban mondtuk, a probléma nemszeparábilis, így az  $\omega$  nem aszimptotikus értékeire nincsen 3 jó kvantumszám, amely a teljes rendszert egyértelműen jellemezné. A 13. ábra egy Grotrian-diagramon mutatja a választott átmeneteket egy adott térerősségnél ( $\omega = 1$ ). A 13. ábra és a 5. táblázat együttesen érzékelteti, hogy semmilyen gondot nem okoztak a különböző típusú ( $\Delta n_3 = 0$ ,  $\Delta n_3 \pm 1$ ) átmenetek. Úgyszintén igaz marad ez a megállapítás a nagyobb  $n_3$  kvantumszámokra és a térerősség három nagyságrendjén keresztül.

Ott, ahol léteznek korábban publikált értékek, azok a miénkkel jól egyeznek, holott számolásainkban a közelítések mindenütt alacsonyabb rendűek. Így joggal mondhatjuk azt, hogy az első ízben általunk megadott értékek hasonló pontosságúak lehetnek.



**13. ábra.** A Grotrian-diagramon a diamágneses Coulomb-probléma korábban publikált összes szigorúan kötött állapota szerepel. Az átmeneteket ott jeleztük, ahol a dipóluserősség értéke ismert (pontosított vonal). Az általunk is számolt átmeneteket folytonos vonal, míg a csak általunk számolt eseteket szaggatott vonal jelzi ( $\omega = 1$ ).

**5. táblázat.** A diamágneses Coulomb-probléma  $|\mathbf{p}|^2$  dipóluserősségei összevetve a korábban Ruder és tsai (1994) által publikált  $|\mathbf{p}_R|^2$  eredményekkel. Az átmeneteket az egyes állapotok aszimptotikus kvantumszámaival jellemeztük.

átmenet	$\omega$	$ \mathbf{p}_R ^2$	$ \mathbf{p} ^2$
$2p_{-1}/0 - 10 \longleftrightarrow 3d_{-1}/0 - 11$	1	1.189	1.187[2]
			1.1892[6]
	10	$3.188 \cdot 10^{-1}$	$3.19 \cdot 10^{-1}$ [2]
			$3.188 \cdot 10^{-1}$ [4]
	100	$8.018 \cdot 10^{-2}$	$8.235 \cdot 10^{-2}$ [1]
$2p_{-1}/0 - 10 \longleftrightarrow 3d_{-2}/0 - 20$	1	$8.741 \cdot 10^{-1}$	$8.743 \cdot 10^{-1}$ [6]
	10	$9.665 \cdot 10^{-2}$	$9.665 \cdot 10^{-2}$ [4]
	100	$9.901 \cdot 10^{-3}$	$9.905 \cdot 10^{-3}$ [1]
$3p_{-1}/0 - 12 \longleftrightarrow 3d_{-1}/0 - 11$	1	8.241	8.2408[6]
	10	4.369	4.3688[2]
	100	3.303	3.308[1]
$3p_{-1}/0 - 12 \longleftrightarrow 3d_{-2}/0 - 20$	1	9.146	$9.147 \cdot 10^{-3}$ [6]
	10	$2.465 \cdot 10^{-4}$	$2.464 \cdot 10^{-4}$ [4]
	100	$7.391 \cdot 10^{-6}$	$7.398 \cdot 10^{-6}$ [1]
$2p_{-1}/0 - 10 \longleftrightarrow 4d_{-1}/0 - 13$	1	—	$4.4502 \cdot 10^{-4}$ [6]
	10	—	$9.699 \cdot 10^{-3}$ [4]
	100	—	$1.7276 \cdot 10^{-2}$ [1]
$3p_{-1}/0 - 12 \longleftrightarrow 4d_{-1}/0 - 13$	1	—	$4.3792 \cdot 10^{-2}$ [6]
	10	—	$1.2318 \cdot 10^{-3}$ [4]
	100	—	7.2918[1]
$3d_{-2}/0 - 20 \longleftrightarrow 4f_{-2}/0 - 21$	1	—	1.7866[6]
	10	—	$4.3063 \cdot 10^{-1}$ [4]
	100	—	$1.2401 \cdot 10^{-1}$ [1]
$4f_{-2}/0 - 21 \longleftrightarrow 4d_{-2}/0 - 22$	1	—	9.6021[6]
	10	—	5.1284[4]
	100	—	2.9267[1]
$2p_{-1}/0 - 10 \longleftrightarrow 4d_{-2}/0 - 22$	1	—	$1.649 \cdot 10^{-4}$ [6]
	10	—	$1.359 \cdot 10^{-5}$ [4]
	100	—	$7.496 \cdot 10^{-6}$ [1]

## 6. Összegzés

A dolgozatban a diamágneses Coulomb-probléma néhány vonatkozását vizsgáltuk meg. Miután megállapítottuk, hogy a feladat – nemszeparábilis volta miatt – mind analitikusan, mind numerikusan nehezen kezelhető, olyan bázisfüggvény-rendszert kerestünk, amelyben a rendszer sajátfüggvényeit kifejtve azok analitikusan nemadiabatikus közelítésben is vizsgálhatók az aszimptotikus tartományok mindegyikében. Ilyen függvényrendszernek bizonyult a lapított gömbfüggvények alkotta bázis gömbi koordináták ( $\omega \leq 1$ ) alkalmazása esetén és a Liu–Starace bázis hengerkoordinátákat ( $\omega \geq 1$ ) használva.

Ezek a függvényrendszerek a szokásosaknál általánosabbak és éppen emiatt alkalmasak arra, hogy már viszonylag kis elemszámú kifejtéseik jól közelítsék a tényleges megoldást, ezáltal lehetővé teszik az analitikus áttekinthetőséget (Barcza 1994, 1996) és az alacsonyrendű numerikus számolást a nemaszimptotikus tartományokban (Balla és Benkő 1996, 1999).

A dolgozatban a nagyobb térerősség-tartománnyal foglalkoztam, s itt a Liu–Starace bázis a megfelelő.

Ezek után következzenek a dolgozat legfontosabb eredményei:

- (i) A (31) módosított Prüfer-transzformáció segítségével sikerült kiküszöbölni azt a korábban senki által le nem küzdött nehézséget, hogy a Liu–Starace bázis függvényei csak numerikusan adhatók meg. Megmutattuk, hogy valójában a függvényekre magukra nincs is szükségünk, a (22) bázisegyenlet  $\mu_n(z)$  sajátértékeit meg tudjuk határozni a teljes  $0 < z < \infty$  intervallumon *elsőrendű, reguláris kezdetiérték-problémák* megoldásával. Ez mind elvi, mind gyakorlati szempontból egyszerűsítést jelent. A szokásos eljárásokkal a sajátértékeket és a sajátfüggvényeket szimultán számolják *másodrendű, szinguláris peremérték-problémák* megoldásán keresztül. Megmutattuk azt is, hogy az aszimptotikus tartományokban a kapott értékeink jól egyeznek az analitikus számolások eredményeivel.
- (ii) Az  $A_{nn'}(z)$ ,  $B_{nn'}(z)$  csatolómátrix-elemeket megadó kvadratikus funkcionálokat sem az azokat alkotó bázisfüggvények kiszámolásával, majd numerikus deriválásával és numerikus integrálással határoztuk meg. Ehelyett egy numerikusan stabil, hatékony eljárással magukat a funkcionálértékeket számoltuk ki az ezekre felírt *kezdetiérték-probléma* megoldásán keresztül. Az aszimptotikával való összevetés itt is a fent elmondottakhoz hasonló eredményt adott.
- (iii) Ezután már felírható az energia-sajátértékre vonatkozó (66) differenciálegyenlet-rendszer. Ennek megoldásánál a (22) skalár problémánál alkalmazottal analóg eljárást használtunk. A *másodrendű, szinguláris rendszert* az adott intervallumon

vele *ekvivalens elsőrendű, reguláris rendszerré* alakítottuk, majd egy a korábban alkalmazott módosított Prüfer-transzformációnak a mátrixok körében megfelelő *differenciális ortogonális faktorizációt* használtunk (Bahvalov 1977). A fenti (i)-(iii) keretet sem erre, sem más nemszeparábilis sajátérték-problémára nem használták előttünk.

- (iv) Mindezen elvi eredmények után bebizonyosodott, hogy a Liu–Starace bázis igen hatékony. Már *néhány csatorna* felhasználásával az egyszerűbb bázisok sokkal nagyobb elemszámú közelítéseit megkaptuk. Továbbá semmilyen gondot nem okozott *magasabban fekvő* állapotokhoz tartozó, *korábban nem publikált* sajátértékek meghatározása sem.
- (v) Az egyes energiaszintek közti átmenetek valószínűséget, és ezzel a színek adott vonalának erősségét a dipóluserősséggel jellemeztük. Ez ismét csak egy kvadratikusan funkcionál, de most mátrixfüggvényekre vonatkozó.

Az ismert volt, hogy a kvadratikusan funkcionálók kiszámítására skaláris esetben alkalmazott (ii) módszerünk általánosítható mátrixokra is, de csak akkor, ha a funkcionálókban szereplő sajátfüggvények egy önadjungált feladat megoldásai (l. Kitoroage és tsai 1989). Sikertelen megmutatnunk, hogy a nemönadjungált feladatok egy jól definiált osztályára (Barcza 1994) *szintén megtehető* ez az általánosítás. Hasonló módszer kvadratikusan funkcionálók kiszámítására nemönadjungált esetre eddig nem létezett.

- (vi) A kvadratikusan funkcionálókra felírt mátrixdifferenciál-egyenletekre vonatkozó (125) *kezdetiérték-probléma* megoldásával jutunk a keresett dipóluserősségekehez. Ebben az esetben is összevetve a korábban publikált értékekkel a mieinket, azt találjuk, hogy az egyezés igen jó, holott a mi közelítésünk rendje sokkal *alacsonyabb*.

Kiszámoltunk továbbá néhány olyan átmeneti dipóluserősséget is, amely eddig *nem volt megtalálható* az irodalomban.

## 7. Köszönetnyilvánítás

A szerző ezúton is szeretné kifejezni köszönetét azoknak, akik nélkül ez a dolgozat nem készülhetett volna el. Mindenekelőtt témavezetőmnek, Barcza Szabolcsnak az MTA Csillagászati Kutatóintézetének főmunkatársának tartozom hálával több éves kitüntető figyelméért és biztatásáért. Nem kevésbé illeti köszönet Balla Katalint, az MTA Számítástudományi és Automatizálási Kutatóintézetének főmunkatársát, akivel közös munkánk képezi a dolgozat gerincét.

Köszönettel tartozom továbbá az MTA Csillagászati Kutatóintézetének, mely lehetővé tette a munka elkészítését. Külön köszönöm Szabados Lászlónak az MTA CSKI főmunkatársának, hogy volt olyan kedves és nyelvi szempontból is átnézte dolgozatomat.

## 8. Függelék

### 8.1. Matematikai kiegészítés

A közönséges differenciálegyenletek és egyenletrendszerek numerikus megoldásának kérdései önálló tudományágat képeznek a matematikán belül. Ezért az alábbiakban csak arra vállalkozom, hogy megpróbálom az általunk alkalmazott módszerhez vezető utat megvilágítani. Az ebben a fejezetben használt jelölések függetlenek a korábbi részek jelöléseitől.

A dolgozat megoldandó (18), (20) feladataira másodrendű, lineáris, explicit egyenletek vonatkoznak. Ismeretes, hogy a másodrendű egyenletek mindig visszavezethetők elsőrendű egyenletrendszerekre (l. pl. Kósa 1985). Ezek után az elsőrendű, lineáris, közönséges differenciálegyenlet(rendszer) általános alakja

$$\mathbf{y}'(x) = A(x)\mathbf{y}(x) + \mathbf{q}(x), \quad a < x < b \quad a, b \in \mathbf{R} \quad (127)$$

ahol  $\mathbf{R}$  a valós számok halmazát jelöli  $\mathbf{y}(x) = (y_1(x), y_2(x), \dots, y_n(x))^T \in \mathbf{R}^n$ ,  $\mathbf{q}(x) \in \mathbf{R}^n$  ( $n$  elemű valós vektorfüggvények),  $A(x) \in \mathbf{R}^{n \times n}$  ( $n \times n$ -es valós mátrixfüggvény),  $n \in \mathbf{N}$  (pozitív egész).

A (127) egyenlet megoldásseregéből a peremfeltételek választják ki az általunk keresett tulajdonságú megoldás(oka)t (ha van(nak) ilyen(ek)). Az általános kétpontos peremfeltétel alakja

$$\mathbf{g}(\mathbf{y}(a), \mathbf{y}(b)) = 0, \quad (128)$$

ahol  $\mathbf{g} = (g_1, g_2, \dots, g_n)^T$  általában nemlineáris vektorfüggvény. A kétpontos feltétel lineáris alakja:

$$B_a \mathbf{y}(a) + B_b \mathbf{y}(b) = \beta, \quad (129)$$

ahol  $B_a, B_b \in \mathbf{R}^{n \times n}$ ,  $\beta \in \mathbf{R}^n$ . Megjegyzendő, hogy az általános, többpontos peremfeltételű feladat mindig kétpontossá alakítható (bizonyítást l. pl. Ascher és tsai 1988 tankönyvében), valamint hogy a nemlineáris peremfeltételek sokszor linearizálhatók. A lineáris peremfeltételek a

$$B_a^{(1)} \mathbf{y}^{(1)}(a) = \beta^{(1)} \quad B_b^{(2)} \mathbf{y}^{(2)}(b) = \beta^{(2)} \quad (130)$$

( $B_a^{(1)} \in \mathbf{R}^{p \times p}$ ,  $B_b^{(2)} \in \mathbf{R}^{s \times s}$ ,  $\beta^{(1)} \in \mathbf{R}^p$ ,  $\beta^{(2)} \in \mathbf{R}^s$ ,  $p + s = n$ .) szeparált alakban is feltehető az általánosság csökkentése nélkül, mivel a (129) feltételű feladat mindig (130) alakra hozható (Moszynski 1964).

A legegyszerűbb szeparált peremfeltétel az, amikor a megoldást egyetlen pontban kötjük ki ( $s = 0$ ), vagyis

$$\mathbf{y}(a) = \alpha, \quad \alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)^T \in \mathbf{R}^n.$$

Ilyen esetben szokás kezdetiérték-feladatról (KÉF), vagy Cauchy-feladatról beszélni. A KÉF megoldásaira jól ismert az egzisztenciát és unicitást kimondó tétel (l. pl. Coddington és Levinson 1955 klasszikus tankönyvét). Szintén ismeretes, hogy a peremérték-feladatokra (PÉF) hasonlóan általános állítás nem teljesül. A következő meglehetősen általános tétel azonban kapcsolatot teremt a PÉF-k és a KÉF között.

Tekintsük az

$$\mathbf{y}' = \mathbf{f}(x, \mathbf{y}), \quad \mathbf{g}(\mathbf{y}(a), \mathbf{y}(b)) = 0 \quad (131)$$

általános PÉF-t és vezessük be a  $\mathbf{w}' = \mathbf{f}(x, \mathbf{w})$ ,  $(x > 0)$ ,  $\mathbf{w}(a) = \mathbf{s}$  KÉF-t!

**Tétel.** Ha  $\mathbf{f}(x, \mathbf{w})$  folytonos a teljes értelmezési tartományán és Lipschitz-tulajdonságú, akkor  $\forall \mathbf{s} \in \mathbf{R}^n$  vektorhoz  $\exists!$   $\mathbf{w}(x, \mathbf{s})$ . Egy  $\mathbf{y}(x) = \mathbf{w}(x, \mathbf{s})$  a PÉF megoldása, ha  $\mathbf{g}(\mathbf{s}, \mathbf{y}(b, \mathbf{s})) = 0$  és viszont, ha  $\exists \mathbf{s}$  olyan, hogy  $\mathbf{g}(\mathbf{s}, \mathbf{w}(b, \mathbf{s})) = 0$ , akkor a PÉF-nak van megoldása és  $\forall \mathbf{s}$ -re, ami ilyen,  $\mathbf{w}(x, \mathbf{s})$  megoldás.

A tétel bővebb magyarázata ill. bizonyítása megtalálható pl. Ascher és tsai (1988) már idézett könyvében, vagy magyarul Stoyan és Takó (1995) könyvében. A fenti tétellel a PÉF megoldását KÉF-ok megoldására vezettük vissza. Ez azért előnyös, mert a KÉF-ok numerikus megoldására *kiváló módszerek* állnak rendelkezésre (leszámítva az ú.n. merev „stiff” egyenleteket). A KÉF numerikus integrálására szolgáló különböző algoritmusokról jó áttekintést ad pl. Hairer és tsai (1987), vagy Stoer és Bulirsch (1980) munkája. Nézzük meg, hogy a fenti PÉF-hoz milyen KÉF-ok társíthatók. Erre több lehetőség is van.

A legegyszerűbb az ú.n. *belövéses módszer* (shooting method), amikor a (131) PÉF helyett az

$$\begin{aligned} \mathbf{y}' &= \mathbf{f}(x, \mathbf{y}), & \mathbf{y}(a, \mathbf{s}) &= \mathbf{s} \\ \mathbf{g}(\mathbf{s}, \mathbf{y}(b, \mathbf{s})) &= 0 \end{aligned} \quad (132)$$

KÉF-ból és algebrai egyenletből álló problémával foglalkozunk, vagyis közvetlenül a fenti tételt alkalmazzuk. Sajnos ezzel az egyszerű módszerrel a gyakorlatban súlyos gondok adódhatnak. Gyakori, hogy bár a PÉF stabil (jól kondicionált) a KÉF instabil (erősen függ  $\mathbf{s}$ -től). Az is előfordulhat, hogy a PÉF-nak van megoldása, de a KÉF-nak nem minden  $\mathbf{s}$  esetén létezik megoldása az  $[a, b]$  intervallumon. Konkrét példák találhatók a fenti viselkedésekre például Ascher és tsai (1988), vagy Stoyan és Takó (1995) munkáiban.

Az instabilitásoknak szemléletesen az az oka, hogy a numerikus megoldások az integrálás során elfajulnak, vagyis a szükséges  $n$  feltételből  $k$  elvész. Ennek a problémának a kiküszöbölésére szolgálnak a lineáris peremfeltételű, lineáris egyenletek esetén a különféle *faktorizációs* (vagy másképpen söprési „sweeping method”) eljárások.

Tekintsük a (127) általános lineáris differenciálegyenletet a (129) lineáris peremfeltétellel. Vezessük be a  $T$  lineáris transzformációt oly módon, hogy  $\mathbf{w}(x) := T^{-1}\mathbf{y}(x)$ ,

és  $\mathbf{g}(x) := T^{-1}\mathbf{q}(x)$ . Ezeket a kifejezéseket beírva (127) egyenletbe kapjuk, hogy  $\mathbf{w}' = T^{-1}(AT - T')\mathbf{w} + \mathbf{g}$ . Az

$$U := T^{-1}(AT - T') \quad (133)$$

jelölés bevezetésével pedig a

$$\mathbf{w}' = U\mathbf{w} + \mathbf{g}, \quad B_a T(a)\mathbf{w}(a) + B_b T(b)\mathbf{w}(b) = \beta \quad (134)$$

feladatra jutunk. Válasszuk meg  $U$ -t úgy, hogy felső háromszögmátrix legyen, azaz

$$U = \begin{pmatrix} U_k^{(11)} & U_{n-k}^{(12)} \\ O_k & U_{n-k}^{(22)} \end{pmatrix} \quad \text{és akkor} \quad \mathbf{g} = \begin{pmatrix} \mathbf{g}_k^{(1)} \\ \mathbf{g}_{n-k}^{(2)} \end{pmatrix}, \quad (135)$$

ahol az alsó indexek mindenütt a dimenziót jelzik. A fenti (135) kifejezést beírva a (134) PÉF-ba azt kapjuk, hogy

$$\mathbf{w}^{(1)'} = U^{(11)}\mathbf{w}^{(1)} + U^{(12)}\mathbf{w}^{(2)} + \mathbf{g}^{(1)} \quad (136)$$

$$\mathbf{w}^{(2)'} = U^{(22)}\mathbf{w}^{(2)} + \mathbf{g}^{(2)} \quad (137)$$

és

$$B_a^{(1)}\mathbf{w}^{(1)}(a) = \beta^{(1)} \quad B_b^{(2)}\mathbf{w}^{(2)}(b) = \beta^{(2)}. \quad (138)$$

A megoldás technikailag a következő lépésekből áll:  $T$  konkrét alakjára a leggyakrabban használt kifejezés a

$$T = \begin{pmatrix} I_{k \times k} & O_{k \times (n-k)} \\ R_{(n-k) \times k} & I_{(n-k) \times (n-k)} \end{pmatrix}. \quad (139)$$

Ekkor az  $U$  definiáló (133) egyenletéből  $T' = AT - TU$  és  $T$  fenti (139) kifejezéséből az

$$R' = A^{(21)} + A^{(22)}R - RA^{(11)} - RA^{(12)}R \quad (140)$$

alakú differenciálegyenletet kapjunk (Riccati-egyenlet). Az  $A$  mátrix particionálása a korábbiaknak megfelelő. Amennyiben  $T$  ismert, ennek segítségével meg lehet szerkeszteni  $U$ -t, majd a (137) egyenletet direkt irányban ( $a$ -tól  $b$  felé), (136) egyenletet pedig ellentétes irányban integráljuk, majd pedig az  $T\mathbf{w} = \mathbf{y}$  lineáris, algebrai egyenlet szolgáltatja a keresett megoldásokat.

Szükségünk van még a  $R(a)$ ,  $\mathbf{w}^{(2)}(a)$ ,  $\mathbf{w}^{(1)}(b)$  kezdeti értékekre. Legyen  $B_a = (C|D)$  alakú, ahol  $D \in \mathbf{R}^{k \times k}$  nonsinguláris mátrix. A  $B_a$  mátrix mindig ilyen alakra hozható (l. pl. Rózsa 1991). Mivel  $\mathbf{w} = T^{-1}\mathbf{y}$ , így  $\mathbf{w}^{(2)}(a) = -R(a)\mathbf{y}^{(1)}(a) + \mathbf{y}^{(2)}(a)$ . Ezek után válasszuk  $R(a) = -DC^{-1}$  alakúnak, amiből következik, hogy  $\mathbf{w}^{(2)}(a) = D^{-1}\beta^{(1)}$ . ( $B_b$  hasonló transzformációja után  $\mathbf{w}^{(1)}(b)$  kezdeti érték is megkapható.) Noha a fenti



eljárás a belövéses módszernél stabilabb az továbbra is előfordulhat, hogy a Riccati-egyenletnek nincs a teljes  $[a, b]$  intervallumon mindenütt megoldása. Ilyenkor az eljárás „felrobban”. Ez kikerülhető, ha „idejében”  $1/R$  változóra térünk át. Az állandó figyelés – és ha szükséges a transzformálások – a numerikus munkát eléggé nehézkessé teszik. A Riccati-egyenlet nemlinearitása szintén hátrányos. Mindezek miatt hasznos lenne egy a megoldások létét garantáló hasonló eljárás. Szintén előnyös volna, ha ezt sikerülne limeáris egyenletekkel megvalósítani. Az adjungált egyenletek elmélete, pontosabban a következő tétel erre módot ad. (Mivel a dolgozatban homogén egyenletek szerepelnek a továbbiakban csak ezekkel foglalkozunk.)

Tekintsük az

$$\begin{aligned} \mathbf{y}'(x) &= A(x)\mathbf{y}(x), \quad x \in [a, b], \\ B_a^{(1)}\mathbf{y}^{(1)}(a) &= 0, \quad B_b^{(2)}\mathbf{y}^{(2)}(b) = 0 \end{aligned} \quad (141)$$

szeparált, homogén peremfeltételű, homogén, lineáris PÉF-ot.

**Tétel.**  $\mathcal{M}$  a (141) egyenlet megoldásainak egy  $k$  dimenziós lineáris altere, akkor és csak akkor, ha  $\exists \phi(x) \in \mathbf{R}^{n \times (n-k)}$  olyan, hogy

- a)  $\text{rang}(\phi(x)) = n - k$ ,
- b)  $\mathbf{y} \in \mathcal{M}$ , akkor és csak akkor, ha  $\forall x \in [a, b]$  esetén  $\phi^T(x)\mathbf{y}(x) = 0$ ,
- c) és kielégíti a  $\phi(x)' + A^T(x)\phi(x) = 0$  egyenletet (az eredeti egyenlet adjungáltját).

(Az eredetileg R. Lagrange-tól származó tételt ilyen alakban l. Abramov 1961.) Ezek után valamely  $x$ ,  $(a < x < b)$  közbülső pontban a megoldás úgy áll elő, hogy az adjungált egyenletet oldjuk meg a két végponttól a közbensőig, ezzel megkapjuk  $\phi(x) = (\phi^{(1)}(x), \phi^{(2)}(x))^T$  megoldást, majd pedig a  $\phi^T(x)\mathbf{y}(x) = 0$  lineáris egyenletrendszer megoldása szolgáltatja a keresett  $\mathbf{y}(x)$ -t (Lagrange-faktorizáció). Megjegyzendő, hogy az adjungált egyenlet lineáris és a megoldhatósága (a lineáris algebrai rendszer megoldhatóságával együtt) szükséges és elégséges feltétele az eredeti feladat megoldhatóságának, vagyis pontosan olyan tulajdonságú, amilyent kerestünk.

Az adjungált egyenletekre válasszuk a kezdeti értékeket a következő módon. Az eredeti feltételt hozzuk  $\tilde{C}^T\mathbf{y}^{(1)}(a) = 0$  alakra, ahol  $\text{rang}(\tilde{C}) = n - k$  nemszinguláris mátrix. Ekkor  $\phi^{(1)}(a) = \tilde{C}S$ , ahol  $S$  nemszinguláris  $n - k$  dimenziós négyzetes mátrix. A másik határfeltétel teljesen hasonlóan adódik. A kezdeti feltételek ilyen megválasztásával a végpontokban automatikusan teljesül a tétel ortogonalitási követelménye. Igazából ezzel, mint egy rögzített bázissal megadtuk a megoldások lineáris alterére merőleges komplementer alteret. A numerikus integrálás során ez a bázis „mozdul el” a végpontokból az  $x$  pont felé. Sajnos semmi nem garantálja, hogy a kezdetben rögzített ortogonális bázis a numerikus integrálás során nem „romlik el”. Ha pedig a bázis összefüggővé válik, a  $\phi$  mátrix numerikus rangja sem marad  $n - k$ . Ezen a problémán lehet úgy segíteni, hogy időnként ellenőrizzük a bázis ortogonalitását és ha

szükséges ortogonalizáljuk. Jobb volna azonban, ha maga az eljárás garantálná, hogy minden lépésben a bázis megőrzi ortogonalitását.

Tegyük a következőket! A  $\phi^T(x)\mathbf{y}(x) = 0$  lineáris egyenletet szorozzuk be balról a  $\nu^T(x) \in \mathbf{R}^{k \times k}$  differenciálható nemszinguláris mátrix-szal. Vagyis tekintsük a  $\nu^T \phi^T \mathbf{y} = 0$  összefüggést. Legyen  $\psi := \phi \nu$ , akkor  $\phi = \psi \nu^{-1}$  és  $\psi^T \mathbf{y} = 0$ . Az adjungált egyenletbe beírva  $\psi$  kifejezését és jobbról beszorozva  $\nu^{-1}$ -gyel kapjuk, hogy

$$\psi' = \psi \omega - A^T \psi, \quad (142)$$

ahol bevezettük az  $\omega = \nu^{-1} \nu'$  jelölést. A majdnem tetszőleges  $\nu$  bevezetése miatt kiróhatjuk a  $\psi$  függvényre a

$$\psi^T(x) \psi'(x) = 0 \quad (143)$$

feltételt. Ez Abramov (1961)-es cikkének lényege. Ha (143) feltétel igaz, akkor abból nyilvánvaló módon következik, hogy  $\psi^T \psi = K$ , ahol  $K$  konstans mátrix (pl. célszerű  $\nu$ -t úgy választani, hogy  $K = I$  legyen). Vagyis, ha a  $\psi$  függvényre vonatkozó egyenletet oldjuk meg, akkor az egyszer ortogonálisan elindított bázis végig ortogonális marad. A  $\psi$  ilyen választása mellett  $\omega = (\psi^T \psi)^{-1} \psi^T A^T \psi$ , és ezt a (142) egyenletbe beírva megkapjuk az Abramov-faktorizáció alapegyenletét

$$\psi' = [\psi(\psi^T \psi)^{-1} \psi^T - I] A^T \psi. \quad (144)$$

Az eljárás használatakor két (144) alakú egyenletet kell numerikusan integrálni (a megfelelő végpontból egy tetszőleges közbenső pontig), valamint a  $\psi^T \mathbf{y} = 0$  homogén lineáris algebrai egyenletet (l. Balla és Benkő 1996). Bár (144) nemlineáris egyenlet, bizonyítható, hogy tetszőleges teljes ragú kezdeti feltétellel van és pontosan egy megoldása.

Abban az esetben, ha csak egyetlen másodredű, lineáris PÉF-ot kell megoldanunk a helyzet a fentieknél lényegesen egyszerűbb. Az  $\mathbf{y} = (y, y')^T$  összefüggés segítségével az egyenletet elsőrendűvé transzformáljuk, majd alkalmazzuk a fenti eljárást! Könnyen látható, hogy a (143) és a  $K = I$  feltételnek akkor tudunk eleget tenni, ha pl.  $\psi = \sin \Theta$  és  $\psi' = \cos \Theta$ , azaz a jól ismert Prüfer-transzformációra jutottunk (l. Pryce 1993). A dolgozatban a (18) bázisegyenlet megoldásánál a Prüfer-transzformáció egy skálázott változatát vezettem be, ténylegesen azonban skálázás nélkül használtam.

Mint azt Bahvalov (1977) megmutatta lehet konstruálni olyan ortogonális faktorizációt is, amely a komplementer tér bázisvektora helyett az eredeti tér bázisát tartja ortogonálisan. Ehhez az eredeti bázist helyettesítjük egy  $\varphi \in \mathbf{R}^{n \times k}$  ortonormálttal. Most is az

$$\varphi^T(x) \varphi(x)' = 0,$$

feltétel és a  $\varphi^T(a) \varphi(a) = I$  kezdeti érték elégséges ahhoz, hogy  $\varphi^T(x) \varphi(x) = I$  legyen. Legyen  $\varphi(x) = W(x)S(x)$  alakú, ahol  $W(x)$  az (141) egyenlet fundamentális mátrixa,

$S(x) \in \mathbf{R}^{k \times k}$  nonszinguláris mátrix. Behelyettesítések, a műveleteket elvégzése és átrendezések után kapjuk, hogy Ekkor  $\varphi' = A\varphi + \varphi S^{-1}S'$  és  $S' = -S(\varphi^T \varphi)^{-1} \varphi^T A \varphi$ . Amiből közvetlenül adódik a Bahvalov-faktorizáció egyenlete (v.ö. (74) egyenlet)

$$\varphi' = [I - \varphi(\varphi^T \varphi)^{-1} \varphi^T] A^T \varphi. \quad (145)$$

Emellett, ha  $\mathbf{y}$  egy megoldása (141) egyenletnek, akkor  $\mathbf{y}(x) = \varphi(x)s(x)$  és  $s(x)$  nem feltétlenül konstans! Egyrészt, tehát ha előírunk egy kezdeti feltételt egy  $\tilde{x}$  pontban ( $\mathbf{y}(\tilde{x}) = \tilde{\mathbf{y}}$ ), akkor  $s(\tilde{x}) = (\varphi^T(\tilde{x})\varphi(\tilde{x}))^{-1} \varphi^T(\tilde{x})\tilde{\mathbf{y}}$  kell legyen, másrészt, mivel a megoldást  $\mathbf{y}(x) = \varphi(x)s(x)$  alakban keressük így  $\varphi s' - \varphi(\varphi^T \varphi)^{-1} A \varphi s = 0$ . Beszorozva  $\varphi^T$ -tal és átszorozva  $(\varphi^T \varphi)^{-1}$ -gyel kapjuk, hogy

$$s' - (\varphi^T \varphi)^{-1} A \varphi s = 0. \quad (146)$$

(Ennek az egyenletnek felel meg a (114) egyenlet.)

A (20) csatolt egyenletrendszer megoldására mind a két fenti módszer használható volt. A hasonlóságok mellett fontos különbségek is vannak az Abramov- és Bahvalov-faktorizáció között. Az átmeneti valószínűségek kiszámítását a Bahvalov-faktorizáció alkalmazása engedte csak meg, ezért szerepelt ez a dolgozat fő részében.

## 8.2. A sajátértékek kiszámítása

A (74) egyenlet megoldására egy hierarchikusan szervezett FORTRAN program készült (`csat45.f` ~ 1200 utasítás: INPUT –  $Z, N, n_3, \omega, z_0, z_\infty, z_c, \varepsilon, \pi_z$  / OUTPUT –  $E_k^{*N}, \mathcal{P}(z)$ ). Ennek legalsó szintjén egy lépésközt optimalizáló negyedrendű Runge–Kutta (R–K) algoritmus áll l. pl. Press és tsai (1992). Ez integrálja a (32) egyenletet kétszer, minden egyes lépésben a megfelelő (35), ill. (36) kezdeti feltételekkel. A  $\varrho_0$  értéket  $z \times 10^{-4}$ -nek választottam.  $\gamma(\varrho_0)$  közelítésére a (26) összeg egy véges része szolgált. A sor gyors konvergenciája miatt a pontosság már megfelelővé vált, ha az egymást követő részletösszegek különbsége  $10^{-3}$  alá csökkent. A  $\varrho_\infty$  érték nem rögzíthető hasonló módon, mivel (29) csak aszimptotikus kifejezés. Egy külön numerikus eljárás választja meg szimultán módon  $\varrho_\infty$ -t és a sorfejtés elemszámát. Egyébként mindkét fenti esetben léteznek egzakt hibabecslések is, utalunk itt Abramov és Balla (1993), valamint Balla (1977) cikkére. A  $\varrho_c$  közbülső pontot  $z$ -vel azonosnak választottam, kivéve a  $z = 0$  esetet, ahol  $\varrho_c = 1$  lett. A program második szintjén a  $\mu_n$  meghatározását egy egyszerű intervallumfelező (biszekciós) eljárás végzi, mint ahogy arra a 4.1 fejezetben utaltunk. A rutin akkor áll le, ha a relatív pontossági elérte a gépi pontosságot  $\mu_n$ -ben  $|(\mu_n^{(i-2)} - \mu_n^{(i-1)})/\mu_n^{(i)}| \leq 10^{-15}$  vagy a  $|\Theta_1(\varrho_c) - \Theta_r(\varrho_c)|/\Theta_1(\varrho_c)$  relatív hiba kisebbé vált, mint  $10^{-12}$ . A felső indexek az első képletben az iterációk számát jelentik. A csatolómátrix elemek kiszámítása úgy történt, ahogy azt a 4.2 fejezetben leírtuk, azaz a (32), (38) és (54) egyenletek szimultán integrálásával. Magukat a numerikus integrálásokat itt is a fenti R–K algoritmus végezte.

Az  $E_k^N$  kiszámításakor adott  $k$  és  $N$  esetén, mind a (75) determináns értékét, mind az  $E_k^N$  egymást követő iterációinak relatív eltéréseit folyamatosan ellenőrzi a program. A determinánst felépítő elemek kiszámítása az (74) egyenlet integrálásával egyenértékű. Az integráló alaprutin a fentiekkel megegyező volt. A (76) összefüggésben az egységmárixtól való eltérést  $M$  darab ekvidisztáns pontban  $z_i = z_0 + (z_\infty - z_0)i/M$  ellenőriztem ( $M = 8$ ). Annak érdekében, hogy a globális hiba egy adott  $\varepsilon$  korlát alatt legyen, minden  $[z_i, z_{i+1}]$  részintervallumon a megengedett lokális hiba  $\varepsilon_{\text{loc}} = \varepsilon/M$  lehetett, és a

$$\sum_{i,j} (Y^T Y - I)_{i,j}^2 < \varepsilon_{\text{loc}} \quad (147)$$

egyenlőtlenségnek teljesülnie kellett. A részintervallumokon a kezdő lépésköz,  $s = (z_{i+1} - z_i)/M_0$  alakú felosztásnál,  $M_0 = 8$  volt. Amennyiben a feltétel a részintervallum végén nem teljesült, az algoritmus visszatért ennek kezdeti pontjára és az  $M_0$  felosztás megduplázódik. Egyéb esetekben a lépésközt változatlanul hagyta, hacsak már előtte sem kellett változtatni, mert a feltétel teljesült. Ilyen esetben a lépésközt megduplázta. Ez a lépésközwálasztó eljárás lehetővé teszi, hogy minden szükséges mennyiséget  $(\mu_n, A_{nn'}, B_{nn'})$  egy adott  $z$ -re csak egyszer számoljunk ki és a kapott értékeket egy csatolt listára fűzzük.

A (74)-es csatolt egyenletrendszer integrálásánál, minden egyes  $z$ -nél szükség van az  $Y^T Y$  mátrix inverzére. Mivel ezek a mátrixok szimmetrikusak és közel vannak az egységmátrixhoz, az inverzük kiszámítására a leghatékonyabb eljárást a Cholesky-dekompozíciót (lásd pl. Press és tsai 1992) használhattuk. A (75)-ban szereplő determináns meghatározását egy LU dekompozíciós algoritmus végzi. Mint korábban mondtuk a sajátérték relatív hibája volt az egyik ellenőrzési és beavatkozási lehetőség. Ha  $|(E_k^{(i-1)} - E_k^{(i)})/E_k^{(i)}| \leq 10^{-6}$ , a program megáll és az  $E_k^{(i)}$ -t elfogadjuk mint kezdeti közelítést a magasabb  $N$  csatornaszámokhoz, vagy a spektrum magasabban gerjesztett állapotaihoz. Figyelemre méltó, hogy ez a kétfajta iteráció egymástól elvben független, így akár párhuzamosíthatók is. Ha  $n_3 \neq 0$ , akkor  $z_0 = 0$ -nak van választva, egyébként  $z_0 = 10^{-3}$ . A legnagyobb jobboldali végpont  $z_\infty = 10$  volt, míg a  $z_c$  közbülső pontot a  $z_0$ -hoz közel választottuk meg, a teljes  $z$  intervallumhoz képest.

### 8.3. A dipóluserősség kiszámítása

A dipóluserősséget, illetve az azokhoz szükséges (93) és (94) dipólmátrix-elemeket a mintegy 1500 utasításból álló **tpn.f** nevű FORTRAN program határozza meg. A programhoz a szükséges bemenő adatokat ( $\text{INPUT} - E_n^{*N}, E_m^{*M}, \mathcal{P}_N(z), \mathcal{P}_M(z), K_{pq}^{nmi}(z)$ ) a **csat45.f** program készíti.

A funkcionál kiszámítása alapvetően két lépésben történik. Először az  $Y^{(n)N}(z)$ ,  $H^{(n)N}(z)$  és  $Y^{(m)M}(z)$ ,  $H^{(m)M}(z)$  függvényekre vonatkozó (74) és (118) mátrix-

differentiálegyenleteket oldjuk meg szimultán módon egy a mátrixegyenletekhez alakított automatikus lépésközwálasztó R–K eljárással. Az integrálás a 8.2 fejezetben ismertetett módon  $z_0$ -tól, ill.  $z_\infty$ -tól  $z_c$ -ig történik. A  $\mathbf{c}$  meghatározása egyenértékű a (121) algebrai sajátérték-probléma egy tetszőleges 1 sajátértékhez tartozó sajátvektorának megkeresésével. Ez úgy történik, hogy egy Jacobi-eljárás (l. Press és tsai 1992) meghatározza a feladat összes sajátértékét, azután az 1-hez legközelebb esőhöz tartozó sajátvektort normáljuk (122) szerint. Az adott sajátérték 1-től való eltérése egyben becslést ad a sajátvektorunk pontosságára. Ezzel megkaphatjuk  $\mathbf{c}^l(z_c)$  és  $\mathbf{c}^r(z_c)$  értékét.

A második lépésben a  $Q^{(nmw)}(z)$  mátrixfüggvényekre vonatkozó (125) egyenletet oldjuk meg szintén a két végponttól,  $z_0^Q$ -tól és  $z_\infty^Q$ -tól  $z_c$ -ig, ahol a  $z_0^Q$  és  $z_\infty^Q$  végpontokat úgy választottuk meg, hogy a  $Q^{(nmw)}(z)$  függvény a két megfelelő  $H^{(n)N}(z)$  és  $H^{(m)M}(z)$  függvény közös részén legyen kiszámolva. A szükséges interpolációkat mindenütt egy egyszerű lineáris interpolációs algoritmus szolgáltatja (l. Press és tsai 1992). A invertálás itt is a 8.2 részben említett Cholesky-eljárással történt.

## 9. Irodalom

- Abramov A A 1961 *Zh. Vychisl. Mat. i Mat. Fiz.* **1** 542 [transl: *USSR J. Comput. Math. and Math. Phys.* **3** 617 (1963)]
- Abramov A A and Balla K 1993 *Zh. Vychisl. Mat. i Mat. Fiz.* **33** 35 [transl: *Comput. Math. and Math. Phys.* **33** 29]
- Abramov A A, Ditkin V V, Konyukhova N B, Pariiskii B S and Ulyanova V I 1980 *Zh. Vychisl. Mat. i Mat. Fiz.* **20** 1155 [transl: *USSR J. Comput. Math. and Math. Phys.* **20**]
- Araya R A and Harding A K 1996 *Astrophys. J.* **463** L33
- Ascher U M, Mattheij R M M and Russel R D 1988 *Numerical Solution of Boundary Value Problems for Ordinary Differential Equations* (Englewood Cliffs: Prentice-Hall)
- Avron J E, Herbst I W and Simon B 1978 *Ann. Phys. (NY)* **114** 431
- Bahvalov N Sz 1977 *A gépi matematika numerikus módszerei* (Budapest: Műszaki)
- Balla K 1977 in *Coll. Math. Soc. János Bolyai* vol 22 (Amsterdam: North-Holland) p 121
- 1988 in *Coll. Math. Soc. János Bolyai* vol 50 (Amsterdam: North-Holland) p 239
- Balla K and Benkő J M 1996 *J. Phys. A: Math. Gen.* **29** 6747
- 1999 *J. Phys. A: Math. Gen.* (submitted) [preprint: MTA SZTAKI LORDS WP 99-1, pp. 1-11]
- Benkő J M and Balla K 1998 in *The Hot Universe* (ed. K Koyama et al) *IAU Symp. Ser.* **188** p. 275
- Barcza S 1984 *Astrophys. Space Sci.* **100** 185
- 1994 *J. Comput. Phys.* **110** 242
- 1996 *J. Phys. A: Math. Gen.* **29** 6765
- Bethe H A and Salpeter E E 1957 in *Handbuch der Physik* vol. 35 ed. Flügge S (Berlin: Springer) p 88
- Birger E S 1968 *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.* **8** 1126 [transl: *USSR J. Comput. Phys. Math. Phys.* **8**]
- Birger E S and Lyalikova N B 1965 *Zh. Vychisl. Mat. i Mat. Fiz.* **5** 979 [transl: *USSR J. Comput. Math. and Math. Phys.* **5** 1]
- Blackett P M S 1947 *Nature* **159** 658
- Chanmugam G 1992 *Ann. Rev. Astron. Astrophys.* **30** 143
- Coddington A and Levinson N 1955 *Theory of Ordinary Differential Equations* (New York: McGraw-Hill)
- Doman B G S 1980 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **13** 3335
- Feynman R 1939 *Phys. Rev.* **56** 340
- Friedrich H and Chu M 1983 *Phys. Rev. A* **28** 1423
- Greene C H and Wang Q 1991 *Phys. Rev. A* **44** 7448
- Hairer E, Nørsett S P and Wanner G 1987 *Solving Ordinary Differential Equations I.* (Berlin: Springer)
- Jordan S 1997 in *White Dwarfs* (eds. Isern J, Hernanz M and García-Berro E) (Dordrecht: Kluwer) p 397
- Kitoroage D I, Konyukhova N B and Pariiskii B S 1987 in *Soobshcheniya po Prikladnoy Mat.* (Moscow: Vychislitel'niy Tsentr AN SSSR) pp 1–67 (in Russian)
- 1989 in *Soobshcheniya po Prikladnoy Mat.* (Moscow: Vychislitel'niy Tsentr AN SSSR) pp 1–68 (in Russian)
- Koester D and Chanmugam G 1990 *Rep. Prog. Phys.* **53** 837
- Konyukhova N B and Pak T V 1987 *Zh. Vychisl. Mat. i Mat. Fiz.* **27** 501 [transl: *USSR J. Comput. Math. and Math. Phys.* **27** 118]
- Kósa A 1985 *Differenciálegyenletek ELTE jegyzet* (Budapest: Tankönyv)
- Kravchenko Yu D, Liberman M A and Johansson B 1996 *Phys. Rev. A* **54** 287

- Lai D and Salpeter E E 1995 *Phys. Rev. A* **52** 2611
- Landau L D és Lifsic E M 1978 *Elméleti fizika III, Kvantummechanika* (Budapest: Tankönyv)
- Landstreet J D 1992 *Astron. Astrophys. Rev.* **4** 35
- 1994 in *Cosmical Magnetism* ed. D. Lynden-Bell, *NATO ASI Ser. C* **422** 55
- Lindgren K A U and Virtamo J T 1979 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **12** 3465
- Liu Ch-R and Starace A F 1987 *Phys. Rev. A* **35** 647
- Martin C, Halpern J P and Schiminovich D 1998 *Astrophys. J.* **494** L211
- Merani N, Main J and Wunner G 1995 *Astron. Astrophys.* **298** 193
- Mészáros P 1992 *High-Energy Radiation from Magnetized Neutron Stars* (Chicago: Chicago Univ. Press)
- Mihalas D 1978 *Stellar atmospheres* (Freeman & Co.: San Francisco)
- Moszynski K 1964 *Algoritmy* **11** 25
- Pauling L and Wilson E B 1935 *Introduction to Quantum Mechanics* (New York: McGraw-Hill)
- Pavlov-Verevkin V B and Zhilinskii B I 1980a *Phys. Lett.* **75A** 279
- 1980b *Phys. Lett.* **78A** 244
- Potekhin A Y 1994 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **27** 1073
- Press W H, Teukolsky S A, Vetterling W T and Flannery B P 1992 *Numerical Recipes* 2nd. Ed. (Cambridge: Cambridge Univ. Press)
- Rózsa P 1991 *Lineáris algebra és alkalmazásai* (Budapest: Tankönyv)
- Pryce J D 1993 *Numerical solution of Sturm–Liouville problems* (Oxford: Clarendon Press)
- Ruder H, Wunner G, Herold H and Geyer F 1994 *Atoms in Strong Magnetic Fields* (Heidelberg: Springer)
- Schiff L I 1968 *Quantum Mechanics* (London: McGraw-Hill)
- Stoer J and Bulirsch R 1980 *Introduction to Numerical Analysis* (Berlin: Springer)
- Stoyan G és Takó G 1995 *Numerikus módszerek 2.* (Budapest: ELTE-TypoTeX)
- Taut M 1995 *J. Phys. A: Math. Gen.* **28** 2081
- Unsöld A 1968 *Physik der Sternatmosphären* (Berlin: Springer)
- Vincke M, Le Dourneuf M and Baye D 1992 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **25** 2787
- Wickramasinghe D T 1995 in *Astrophysical Applications of Powerful New Databases* eds. S J Adelman and W L Wiese, *ASP Conf. Ser.* **78** 319
- Wunner G, Rösner W, Herold H and Ruder H 1985 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **18** L179